

**Departamento de Física Teórica de la Materia**

**Condensada**

Universidad Autónoma de Madrid

**UNA APROXIMACIÓN TEÓRICA A LAS  
PROPIEDADES FOTÓNICAS DE LOS ÓPALOS  
ARTIFICIALES**

Fernando López-Tejeira Sagüés

Memoria que el candidato presenta para optar al Grado de Doctor por la  
Universidad Autónoma de Madrid

**Director:** Dr. José Sánchez-Dehesa Moreno

**Tutor:** Dr. Enrique Velasco Caravaca

2004









---

# Agradecimientos

---

Pese a que pueda parecer un tópico, debo empezar esta sección de agradecimientos mencionando a mi director, el profesor José Sánchez-Dehesa, con quien siempre estaré en deuda por haberme ofrecido la oportunidad de acercarme al mundo de la investigación nada más terminar mi licenciatura.

También quiero hacer constar mi gratitud hacia los miembros del Grupo de Cristales Fotónicos del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM) y de la Unidad Asociada CSIC-UPV, con los que he tenido la ocasión de colaborar muy estrechamente durante todo el periodo de elaboración de esta tesis.

Y aunque resulte más difícil ponerles un rostro, tampoco puedo olvidarme de los organismos públicos (Unión Europea y Ministerio de Ciencia y Tecnología) que mediante diversas becas pre-doctorales me han permitido dedicarme (casi) por entero a la investigación durante los últimos cinco años.

Desde un punto de vista más personal, quiero expresar mi sincero agradecimiento a todos los miembros del Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada de la UAM, entre los que me gustaría destacar a mi tutor de tesis, el profesor Enrique Velasco, y, por razones bien distintas, a mis “compañeros del metal” de la 5ª planta, pasados y presentes. Gracias por vuestra ayuda y compañía y por hacer que el tiempo pasado entre las paredes del C-V me haya servido para aprender, además de física, otro gran número de cosas útiles que quizá no sea prudente especificar aquí...

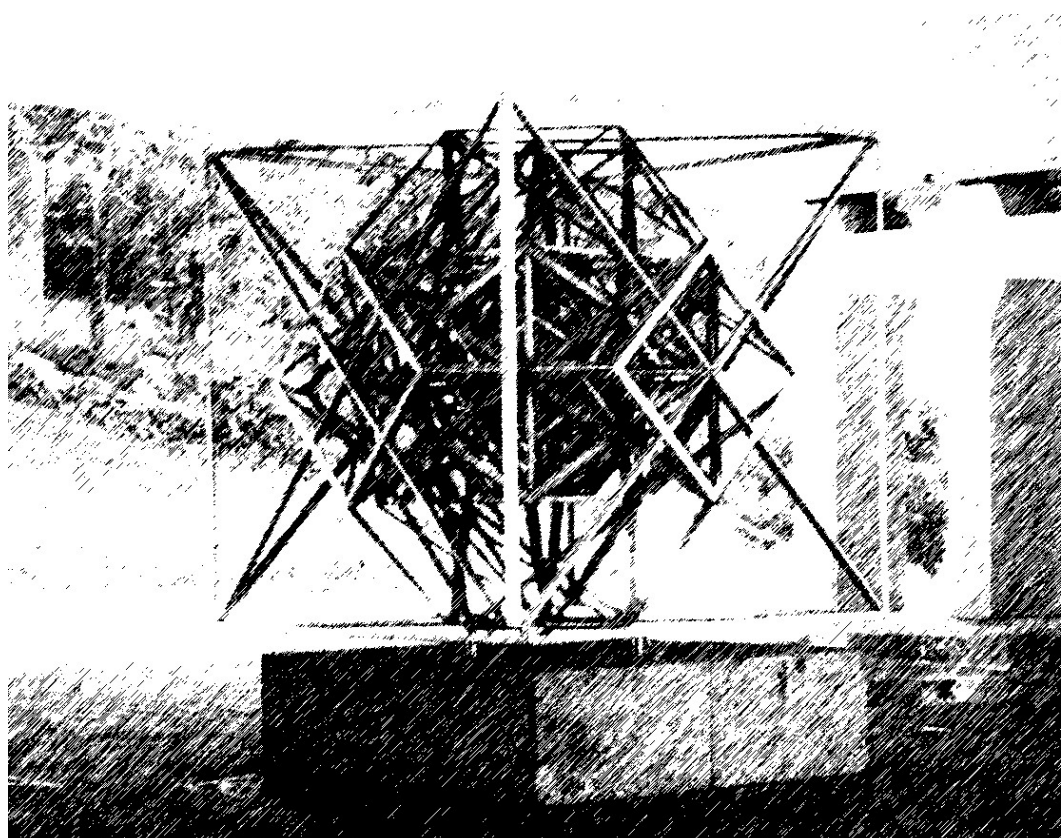
Mención aparte merece mi “hermano mayor” David Caballero, extraordinario científico y aún mejor persona, con quien tuve la fortuna de compartir despacho durante más de tres años y que con su infinita paciencia ha contribuido a aclarar lo poco que sé de física y de la vida en general.

En lo que a la elaboración de la memoria se refiere, debo destacar muy especialmente el consejo y la ayuda prestados por Juan Antonio Porto, amable víctima voluntaria de la neurosis habitual en estos casos. A Juanjo Carracedo y a Cristina Brändle les agradezco

su desinteresado asesoramiento en las cuestiones lingüísticas y de notación matemática, aunque, como es lógico, solamente a mí deben atribuirse los errores que hayan podido deslizarse en el texto. Tampoco puedo olvidarme de la ayuda prestada por Alberto Amo, Lía García y Roberto Lario a la hora conseguir algunas de las referencias incluidas en la bibliografía.

Y ya por último, quiero expresar mi gratitud hacia mis padres, que, pese a no estar relacionados de una forma tan directa con la tesis, han tenido que convivir con todo el largo proceso de su elaboración. Soy consciente de que eso no siempre ha sido fácil.

Madrid, diciembre de 2003



---

# Índice general

---

<b>1. Introducción general a la memoria</b>	<b>1</b>
<b>2. ¿Cristales fotónicos?</b>	<b>5</b>
2.1. Introducción . . . . .	7
2.2. Planteamiento formal del problema . . . . .	11
2.2.1. Estructura de bandas . . . . .	15
2.2.2. Sistemas Finitos . . . . .	18
Sistemas periódicos en el plano . . . . .	18
Sistemas estrictamente finitos . . . . .	25
2.3. Sistemas reales . . . . .	26
2.3.1. Técnicas de micro-fabricación: la calidad ante todo . . . . .	27
2.3.2. Sistemas auto-ensamblados: cuando el tamaño sí importa . . . . .	28
Ópalos artificiales . . . . .	30
Copolímeros en bloque . . . . .	31
Auto-ensamblaje orientado . . . . .	32
2.4. Apuntes cronológicos . . . . .	33
Referencias . . . . .	36
<b>3. Métodos de cálculo y modelización</b>	<b>47</b>
3.1. Expansión en ondas planas (PWE) . . . . .	49
3.2. Método de la Matriz de Transferencia (TMM) . . . . .	52
3.2.1. Obtención de la estructura de bandas . . . . .	57
3.2.2. Cálculo de espectros de reflectancia y transmitancia . . . . .	58
3.2.3. Validez de la aproximación . . . . .	63
3.3. Discretización del dominio temporal (FDTD) . . . . .	65
3.3.1. Cálculo de bandas y espectros . . . . .	67

3.3.2. Limitaciones, ventajas e inconvenientes . . . . .	70
3.4. Expansión en multipolos esféricos (layer-KKR) . . . . .	72
3.4.1. Cálculo de bandas y espectros . . . . .	74
3.4.2. Validez de la aproximación . . . . .	75
3.5. Otros métodos . . . . .	79
Referencias . . . . .	80
<b>4. Caracterización de las simetrías del campo electromagnético</b>	<b>85</b>
4.1. Introducción . . . . .	87
4.2. Operaciones de simetría en sistemas periódicos . . . . .	87
4.2.1. Algunas definiciones . . . . .	87
4.2.2. Autofunciones y operadores de simetría . . . . .	90
4.2.3. Teoría de Representaciones . . . . .	91
4.2.4. En resumen... . . . .	92
4.3. Caracterización de las propiedades de simetría . . . . .	93
4.3.1. Evaluación del carácter de las representaciones en $\mathcal{L}_{\mathbf{k}}$ . . . . .	93
4.3.2. De la simetría de las autofunciones a la simetría de las bandas . . . . .	94
4.4. Aplicación al caso del campo electromagnético . . . . .	97
Referencias . . . . .	101
<b>5. Presentación de resultados (I)</b>	<b>105</b>
5.1. Algunas cuestiones previas . . . . .	107
5.1.1. Un modelo sencillo para la dirección (111): la Ley de Bragg . . . . .	108
5.1.2. Hacia un índice de refracción efectivo . . . . .	110
¿Un modelo analítico para el modelo analítico? . . . . .	113
Experimentos numéricos . . . . .	114
5.2. Propiedades fotónicas de los ópalos desnudos . . . . .	115
5.2.1. Efecto de la sinterización en los pseudogaps de los puntos L y X . . . . .	115
5.2.2. Dependencia angular de la respuesta espectral en la cara {111} . . . . .	118
5.2.3. Caracterización de la simetría de los autoestados . . . . .	120
Clasificación de las bandas . . . . .	121
Autoestados inaccesibles por razones de simetría . . . . .	124
Estimación del acoplamiento con la luz incidente . . . . .	125
Efectos de la simetría en la respuesta espectral (I) . . . . .	129
Efectos de la simetría en la respuesta espectral (II) . . . . .	132
5.3. Conclusiones . . . . .	137

Referencias . . . . .	137
<b>6. Presentación de resultados (II)</b>	<b>141</b>
6.1. Ópalos inversos de CdS: modelos de crecimiento . . . . .	143
6.2. Estructuras con la simetría de una red diamante . . . . .	148
6.2.1. Fabricación directa de una red diamante de esferas dieléctricas . .	148
Una idea loca... . . . .	148
...que al final se hizo realidad . . . . .	152
6.2.2. Auto-ensamblaje orientado de esferas a partir de cadenas (110) . .	154
6.3. Conclusiones . . . . .	160
Referencias . . . . .	161
<b>7. Conclusiones generales</b>	<b>165</b>
<b>A. Demostración del Teorema de Construcción de <math>\mathcal{G}_0(\mathbf{k})</math></b>	<b>167</b>
<b>B. Relaciones de compatibilidad entre representaciones</b>	<b>169</b>
B.1. Reducción de representaciones . . . . .	169
B.2. Puntos especiales de una red fcc . . . . .	170
<b>C. Publicaciones</b>	<b>173</b>



# CAPÍTULO 1

---

## Introducción general a la memoria

---

*Podrá suceder que volváis a vuestra tesis incluso decenas de años más tarde. Pues habrá sido como vuestro primer amor y os resultará difícil olvidarla. En el fondo, habrá sido la primera vez que hacéis un trabajo científico serio y riguroso, lo cual como experiencia no es poco.*

Umberto Eco *Cómo se hace una tesis*

Quizá uno de los momentos más críticos en la elaboración de la memoria de tesis consista precisamente en escoger el título. Éste debe dar una idea ajustada de su contenido sin resultar, al mismo tiempo, demasiado farragoso, pretensión que podría impulsar a un candidato “temerario” a decantarse por una fórmula excesivamente lapidaria que luego sería puesta en evidencia por las inevitables limitaciones de su trabajo. En el otro extremo, un candidato “tímido” preferiría refugiarse en un título de varios renglones, con puntos, paréntesis y poco menos que notas al pie, con el fin de evitar toda sombra de deshonestidad científica. Y dado que ninguna de estas elecciones extremas goza de buena acogida entre los directores de tesis, la práctica más habitual consiste en recurrir a una solución de compromiso.

Ésa ha sido la decisión finalmente adoptada en el caso que nos ocupa, escogiendo un título que, sin llegar a encontrarse completamente satisfactorio, sí nos ha parecido capaz de reunir con acierto los muy diversos trabajos realizados en estos cinco años de investigación, unidos todos ellos por el hecho de referirse al uso como cristales fotónicos de estructuras basadas en la geometría de los ópalos artificiales.

Los cristales fotónicos, resultado de la extensión del concepto de periodicidad a los problemas electromagnéticos, constituyen uno de los avances más significativos de la

ciencia de materiales en los últimos quince años a causa de sus enormes posibilidades tecnológicas, motivo por el cual han venido siendo objeto de un intenso trabajo teórico y experimental en el que también debe inscribirse la presente investigación.

Dentro de un marco tan amplio, la elección de los ópalos artificiales como tema concreto de nuestro estudio tuvo su origen en las innegables ventajas de índole práctica que presentan dichos sistemas, aunque tampoco tenemos inconveniente en reconocer que esta decisión se veía especialmente favorecida por la intensa y fructífera relación científica que nos une al Grupo de Cristales Fotónicos del ICMM, líder mundial en la fabricación y caracterización de este tipo de estructuras.

Con respecto a las líneas generales de elaboración de la memoria, me gustaría destacar que el criterio escogido para presentar los resultados atiende antes al tipo de estructura estudiada que al desarrollo cronológico de la investigación. Consecuentemente, trabajos básicamente contemporáneos aparecen en capítulos distintos y viceversa. La bibliografía relacionada con el contenido de cada capítulo se incluye siempre al final del mismo, con el objeto de hacer más manejable la lista de referencias. Por lo demás, se ha intentado (al lector le corresponde juzgar con qué éxito) violentar el idioma lo menos posible, aunque el uso de términos como “gap” o “scattering” resulta poco menos que inevitable. En lo que a convenciones tipográficas se refiere, sólo cabe señalar el empleo de la **negrita** en la primera mención de cada concepto físico sustantivo, aunque también se ha hecho un uso excepcional de la misma para resaltar algunos de los enunciados de mayor importancia.

Y como no parece sensato negar los propios orígenes, es de justicia reconocer que todo el tratamiento formal y conceptual del electromagnetismo a lo largo de la memoria está fuertemente impregnado de las técnicas, convenciones (¡y manías!) de la física de la materia condensada, cuyo conocimiento se supone implícitamente al lector, aunque no hasta al punto de resultar imprescindible para la comprensión de lo expuesto.

## Estructura de la memoria

Después de esta pequeña introducción, la tesis propiamente dicha se inicia con el Capítulo 2, en el que se presentan los sistemas físicos objeto de estudio junto a las herramientas teóricas necesarias para este propósito. También se incluyen algunas consideraciones históricas y una breve descripción de los distintos tipos de cristales fotónicos.

El Capítulo 3 se dedica por entero a una revisión de los diversos métodos numéricos empleados para el cálculo de bandas y espectros en el transcurso de la presente investigación, señalando sus ventajas e inconvenientes y el grado de fiabilidad de los resultados obtenidos con cada uno de ellos.



La descripción de cómo es posible llegar a la caracterización de las propiedades de simetría del campo electromagnético a partir de diversos resultados formales de la Teoría de Representaciones constituye el objeto del Capítulo 4. Pese a ser el que más se aparta formalmente del resto, su inclusión nos ha parecido necesaria para dar un respaldo sólido al concepto de autoestado “no accesible”.

En los Capítulos 5 y 6 se presentan los resultados originales, separados en dos grupos en función de si la estructura objeto de estudio es un ópalo “desnudo” o bien cualquier otra de las también basadas en el ensamblaje de nanopartículas esféricas. A la exposición de resultados le sigue la de las conclusiones generales recogidas en el Capítulo 7, último de entre los que componen el cuerpo principal de la memoria.

Finalmente, los Apéndices, en los que se recogen algunos detalles técnicos relacionados con la Teoría de Representaciones que pueden resultar interesantes para los lectores más familiarizados con su formalismo.



# CAPÍTULO 2

## ¿Cristales fotónicos?

*A medida que subía ahora los agotadores e interminables escalones se sentía acosado y sorprendido por su casi infinitud. Pero no se trataba del horror de un sueño o de algo que podría ser una exageración o una alucinación. Su infinitud era más como la vacía infinitud de la aritmética, algo impensable, y, sin embargo, necesario para el pensamiento.*

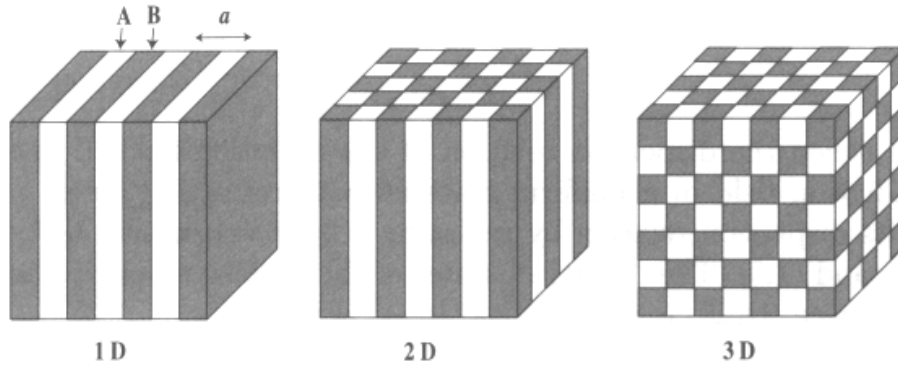
G. K. Chesterton *El hombre que era Jueves*

En este capítulo se presentan los sistemas físicos objeto de estudio junto a las herramientas teóricas necesarias para este propósito. También se incluyen algunas consideraciones históricas y una breve descripción de los distintos tipos de cristales fotónicos.

### Contenido

<b>2.1. Introducción</b>	<b>7</b>
<b>2.2. Planteamiento formal del problema</b>	<b>11</b>
2.2.1. Estructura de bandas	15
2.2.2. Sistemas Finitos	18
Sistemas periódicos en el plano	18
Sistemas estrictamente finitos	25
<b>2.3. Sistemas reales</b>	<b>26</b>
2.3.1. Técnicas de micro-fabricación: la calidad ante todo	27
2.3.2. Sistemas auto-ensamblados: cuando el tamaño sí importa	28
Ópalos artificiales	30
Copolímeros en bloque	31
Auto-ensamblaje orientado	32
<b>2.4. Apuntes cronológicos</b>	<b>33</b>
<b>Referencias</b>	<b>36</b>





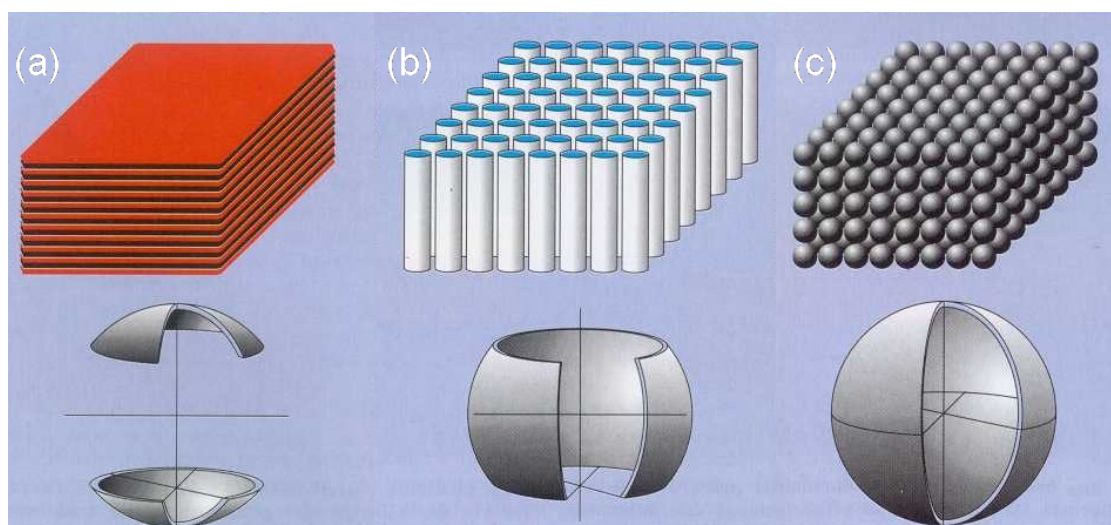
**Figura 2.1** : Ilustración esquemática del concepto de cristal fotónico en 1, 2 y 3 dimensiones, tomada de [Sakoda01]. Los distintos colores de los materiales  $A$  y  $B$  simbolizan la diferencia en sus índices de refracción. La letra  $a$  indica el parámetro de red del sistema.

## 2.1. Introducción

Puestos a comenzar, lo más razonable es hacerlo por el principio, es decir, definiendo **cristal fotónico** como un sistema con una modulación **periódica** en su **índice de refracción**.<sup>1</sup> Así, una multicapa como las que se utilizan comúnmente en óptica podría considerarse un cristal fotónico unidimensional, que en el caso más simple posible estaría compuesto por la superposición de capas alternas de dos materiales  $A$  y  $B$  con distinto índice de refracción. Como muestra la Fig. 2.1, la extensión del concepto a dos y tres dimensiones es enteramente trivial. El periodo  $a$  de la repetición vendría a constituir así el **parámetro de red** de nuestra estructura, en un sentido análogo al de las redes atómicas cristalinas.

Como el lector quizá ya conozca, la característica más interesante de estos sistemas es la aparición de un **rango de frecuencias prohibidas** (gap) para la propagación de la radiación electromagnética en determinadas direcciones del espacio. Pero, para llegar a ese punto, se hace necesario retroceder un poco: desde los inicios de la aplicación de las técnicas de la mecánica cuántica a los sistemas cristalinos, es bien conocido que los electrones dentro de un sólido, al verse afectados por la distribución periódica de potencial creada por la ordenación de los átomos, experimentan fenómenos de interferencia destructiva que provocan la aparición de bandas de energía prohibidas para la propagación electrónica dentro del cristal. Y ha sido precisamente la utilización cada vez

<sup>1</sup>Como una primera aproximación “ingenua” a este concepto, podemos decir que el índice de refracción  $n$  de un material nos da una idea de “cuánto más despacio” se propaga a través del mismo una onda electromagnética, en comparación con el vacío.



**Figura 2.2 :** Realizaciones más comunes de los cristales fotónicos en 1 **(a)**, 2 **(b)** y 3D **(c)**. En la parte inferior se simboliza la máxima extensión direccional posible del intervalo de frecuencias prohibidas en cada una de las situaciones. (Reelaborado a partir de [Meseguer99])

más hábil de esta propiedad la que ha permitido el espectacular avance de la física de semiconductores, que a su vez ha revolucionado la ciencia de materiales, la tecnología e incluso la vida cotidiana en los últimos cincuenta años.

Pues bien, tal y como ya señalaron varios trabajos publicados desde finales de los años setenta del pasado siglo, es posible generalizar los conceptos de la física electrónica<sup>2</sup> a un nuevo tipo de sistemas en los que la modulación periódica del índice de refracción sustituye a la del potencial atómico, y el campo electromagnético a los electrones.<sup>3</sup> Continuando la analogía con los sistemas electrónicos, no es difícil entender que la aparición de un rango de frecuencias prohibidas para la propagación de la radiación electromagnética en cualquier dirección dentro del material no puede lograrse sin el control de las propiedades ópticas del sistema en las tres dimensiones del espacio. Esta es precisamente la idea que se quiere plasmar en la parte inferior de la Fig. 2.2, que también nos sirve para introducir las realizaciones más comunes de los cristales fotónicos: en el caso unidimensional (láminas), se puede evitar la propagación de la luz a lo largo de la dirección característica, en el de dos dimensiones (red de cilindros), se puede suprimir en un plano, y en el de tres (red de esferas), en todo el espacio.

<sup>2</sup>En la sección 2.4 se discutirá con algún detalle la espinosa cuestión de a quién corresponde tal mérito.

<sup>3</sup>Nótese que la denominación de *cristal fotónico* entraña un cierto “abuso de notación”, ya que en la mayoría de los casos la introducción explícita del formalismo cuántico para la descripción del campo electromagnético no es estrictamente necesaria.

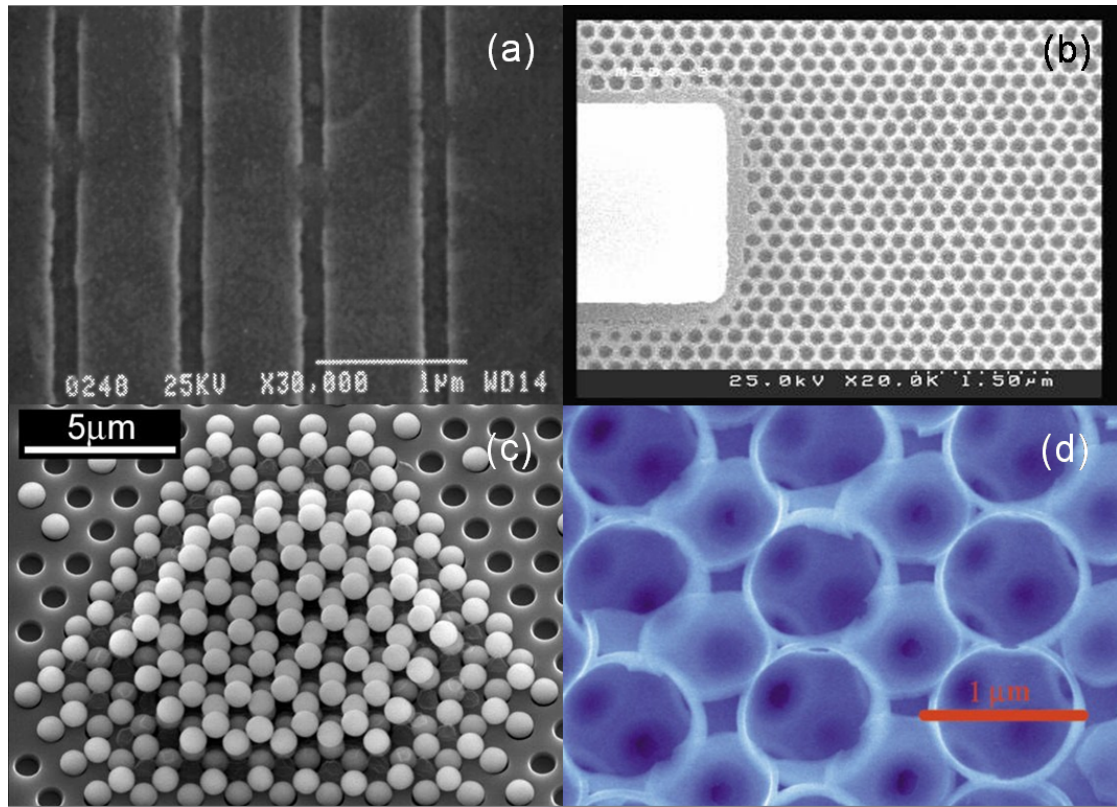
Pese a ser una condición necesaria, la periodicidad tridimensional no basta, sin embargo, para garantizar la presencia de un gap completo. En primer lugar, debemos tener en cuenta que el carácter intrínsecamente vectorial del campo electromagnético introduce un grado de libertad adicional en el problema: la **polarización**. Así, el rango absoluto de frecuencias prohibidas viene ahora determinado por el solapamiento entre los de los dos posibles estados (vertical y horizontal, TE y TM, *s* y *p*...) en los que siempre puede descomponerse cualquier polarización arbitraria del campo, una condición mucho más restrictiva que la del caso escalar. Además, otra serie de factores como el **contraste de índices** entre los distintos componentes, el tipo de **red cristalina**, el **factor de llenado**<sup>4</sup> o la **conectividad** del sistema también han de ser tenidos en cuenta. En términos generales, puede decirse que la configuración más favorable para la aparición de un gap completo es la de una red cristalina con una **Primera Zona de Brillouin** lo más **isótropa** posible, un elevado contraste de índices de refracción entre sus componentes, un factor de llenado alto para el de menor índice y una conectividad del tipo *network*, es decir, con las zonas de mayor índice de refracción formando un dominio conexo.<sup>5</sup>

A causa de su indisoluble asociación con fenómenos de interferencia múltiple, el concepto mismo de “cristal fotónico” sólo tiene sentido cuando la modulación espacial del índice de refracción es del orden de la del campo electromagnético (o sea, de su **longitud de onda**  $\lambda$ ), es decir cuando el medio no es homogéneo a los efectos de la propagación de la luz. La condición  $\lambda \sim a$  se convierte así en el indicador de la escala de operación del dispositivo, que intentaremos ajustar a nuestra mejor conveniencia: centímetros para el rango de microondas, micras para el del infrarrojo y centenares de nanómetros en el caso de la luz visible. Como consecuencia directa de dicha condición, obtener intervalos de frecuencias prohibidas por debajo del infrarrojo constituye un reto tecnológico nada trivial, al implicar modulaciones por debajo de la micra en el índice de refracción del sistema. Afortunadamente, los continuos avances de la nanotecnología y la ciencia de materiales han logrado resolver con bastante éxito ese tipo de problemas técnicos, permitiendo la construcción de sistemas reales análogos a los de la Fig. 2.2. Sirvan como ejemplo las imágenes de **microscopía electrónica de barrido** (SEM) que se muestran en la Fig. 2.3, sacadas de la literatura científica más reciente.<sup>6</sup>

<sup>4</sup>Entendido como porcentaje de los diversos componentes sobre el volumen total.

<sup>5</sup>El análisis del significado físico y la importancia relativa de cada uno de esos factores excede con mucho nuestros objetivos y ha sido objeto de un estudio exhaustivo durante los últimos quince años, por lo que nos vamos a limitar (al menos por el momento) a dar por buenos estos criterios sin entrar en más detalles, que sí pueden encontrarse en [Joannopoulos95] (obra de referencia básica y principal del campo) y también en otros trabajos más específicos como [Ho90], [Chan94] o [Busch98].

<sup>6</sup>Para obtener una idea general de los últimos avances en el campo, remitimos al lector interesado a [Soukoulis01b] y [Adibi02].



**Figura 2.3 :** Imágenes SEM de cristales fotónicos reales sacadas de la literatura. **(a)** Estructura de capas alternas de Si y SiO<sub>2</sub>, referida como espejo Bragg  $\lambda/4$  en [Patrini02]. **(b)** Red hexagonal de cilindros de aire en un sustrato de AlGaAs, empleada como espejo para una cavidad láser en [Happ00]. **(c)** Imagen de la cara {111} de una estructura diamante de esferas de SiO<sub>2</sub>, en [García-Santamaría02]. **(d)** Imagen de la cara {110} de una estructura fcc de esferas de aire en Si, en [Blanco00].

Resulta obvio que el control directo de las propiedades ópticas, en conjunción con otras técnicas bien asentadas tales como la **holografía** o la transmisión de señal a través de fibra óptica, ofrece innumerables posibilidades desde el punto de vista de las aplicaciones tecnológicas, entre las que no podemos dejar de mencionar el ya clásico ejemplo de la **inhibición de la emisión espontánea**, propuesto por vez primera en [Yablonovitch87]: si en un sistema con inversión de población se hiciera coincidir la banda de energías prohibidas con la frecuencia de decaimiento radiativo, se podría reducir drásticamente el umbral de corriente necesario para lograr dicha inversión de población, lo cual permitiría construir láseres mucho más eficientes que los actuales.

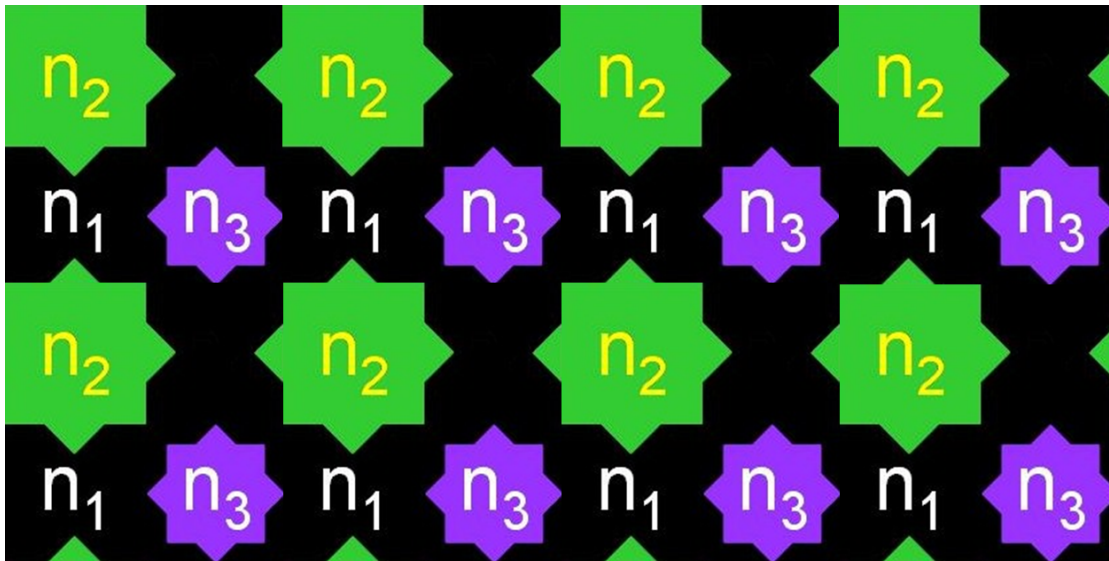
Dejando de lado ese ejemplo, en el que, al igual que en otros como las guías de onda con curvas en ángulo recto, los multiplexores o las antenas direccionales, se utilizan las propiedades fotónicas desde un punto de vista meramente accesorio (para evitar las



pérdidas), es posible plantarse un avance más fundamental: si en comparación con los cristales atómicos, el cambio de los electrones por el campo electromagnético permite esquivar los inconvenientes (disipación de calor y polución electromagnética) que presenta el movimiento de partículas con carga a velocidades cada vez más elevadas, no es difícil intuir que la continuación natural de esta sustitución es el uso de los cristales fotónicos como el fundamento de un nuevo paradigma científico-tecnológico basado en la **computación óptica**.<sup>7</sup> Y aunque a día de hoy este propósito esté aún muy lejos de convertirse en realidad, no cabe duda de que será uno de los retos más apasionantes de la ciencia de materiales en el próximo futuro. En cualquier caso, a nosotros nos sirve para concluir esta pequeña parte introductoria y comenzar el desarrollo de conceptos físicos más rigurosos.

## 2.2. Planteamiento formal del problema

Desde un punto de vista meramente formal, la principal conclusión de la sección anterior es que nos enfrentamos al problema de la propagación de la luz en un medio material compuesto por diversos dominios (conexos o no) con índice de refracción **uniforme**, distribuidos periódicamente.



**Figura 2.4 :** Interpretación pictórica de un cristal fotónico como distribución periódica de dominios con índice de refracción uniforme.

<sup>7</sup>[McGurn00] y [John01] constituyen buenos ejemplos de recientes trabajos en ese sentido.

Las herramientas más útiles para estudiar este tipo de sistemas son, naturalmente, las **ecuaciones de Maxwell** en su versión macroscópica<sup>8</sup>, es decir

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} \quad (2.4)$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  son, respectivamente, los **campos eléctrico y magnético macroscópicos**,  $\mathbf{D}$  el **campo de desplazamiento**,  $\mathbf{B}$  el **campo de inducción magnética**,  $\rho$  y  $\mathbf{J}$  las **densidades de carga y corriente libres** y  $c$  el módulo de la **velocidad de la luz** en el vacío.

A partir de esta su expresión más general, vamos a imponer una serie de restricciones para simplificar el problema. En primer lugar, supondremos que en el material no hay ni corrientes ni cargas libres ( $\rho = 0$ ;  $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ ), con lo que todos los miembros a la derecha de las ecuaciones van a ser estrictamente iguales a cero:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (2.8)$$

A continuación, a la hora de establecer las **relaciones constitutivas** entre los campos  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  dentro de cada dominio, consideraremos:

1. Que la **permeabilidad magnética**  $\mu$  es aproximadamente igual a la unidad, con lo que podemos sustituir  $\mathbf{B}$  por  $\mathbf{H}$  en (2.5) y (2.6).
2. Que la intensidad de los campos involucrados es lo suficientemente baja como para despreciar los efectos no lineales en la relación entre  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{D}$ . Es decir,

$$\mathbf{D} = \overleftrightarrow{\varepsilon} \mathbf{E} + O(\mathbf{E}^2) \quad (2.9)$$

---

<sup>8</sup>De acuerdo con la convención más frecuente en la literatura, se empleará de aquí en adelante el *sistema gaussiano* de unidades, con indicación expresa de las eventuales excepciones.

3. Que el medio es isótropo,<sup>9</sup> de forma que los campos  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{E}$  se relacionan por medio de una función escalar.

En este nuevo lenguaje en el que la **permitividad dieléctrica**<sup>10</sup> sustituye al índice de refracción, resulta conveniente definir la **función dieléctrica global**. Si expresamos nuestro sistema  $S$  como la **unión de diversos dominios homogéneos**  $S = S_1 \cup S_2 \cup \dots$ , entonces

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_1 & \text{si } \mathbf{r} \in S_1 \\ \varepsilon_2 & \text{si } \mathbf{r} \in S_2 \\ \vdots & \vdots \\ \varepsilon_i & \text{si } \mathbf{r} \in S_i \\ \vdots & \vdots \end{cases}$$

(De aquí en adelante, nos referiremos siempre a este objeto como “función dieléctrica”, sin más precisiones.)

Después de las consideraciones anteriores, el problema inicial quedaría reducido a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas sobre los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$ :

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \quad (2.10)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (2.11)$$

$$\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{E} = 0 \quad (2.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (2.13)$$

Olvidémonos por un momento de las ecuaciones (2.10) y (2.12). Manipulando convenientemente las otras dos, podemos transformarlas en ecuaciones diferenciales independientes para  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$ :

$$\frac{1}{\varepsilon} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.14)$$

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon} \nabla \times \mathbf{H} \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (2.15)$$

<sup>9</sup>El carácter tensorial de  $\varepsilon$  no supondría un obstáculo insalvable, pero complicaría innecesariamente el resto de la argumentación. Un buen ejemplo de cómo tratar sistemas **anisótropos** puede encontrarse en [Busch99].

<sup>10</sup>Es posible generalizar el concepto de índice de refracción, definiendo un  $n_c = n + i\kappa$  que se relaciona con la permitividad  $\varepsilon$  por medio de la expresión  $n_c^2 = \mu\varepsilon$ . Para más detalles, consúltese cualquier libro de óptica electromagnética, como por ejemplo [Cabrera93].

Aunque hasta este momento no hayamos entrado a considerar la dependencia temporal de los campos, la forma de (2.14) y (2.15) sugiere la conveniencia de intentar una **separación de variables**, en el mejor estilo de los métodos matemáticos de la física. Si suponemos que  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = f(t)\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r})$  y realizamos las sustituciones oportunas,<sup>11</sup>

$$\frac{1}{\varepsilon} \left( f(t) \frac{\partial^2 \tilde{E}_j}{\partial x_j \partial x_i} - f(t) \delta_{ij} \frac{\partial^2 \tilde{E}_j}{\partial x_l \partial x_l} \right) = - \frac{\tilde{E}_i}{c^2} \frac{d^2 f(t)}{dt^2} \quad (2.16)$$

no tardaremos en darnos cuenta de que es posible agrupar cada tipo de variables en un lado de la ecuación, lo que nos permite introducir una **constante de separación** y tratar la dependencia temporal de  $\mathbf{E}$  como un problema independiente:

$$\frac{c^2}{\varepsilon} \left( \frac{1}{\tilde{E}_i} \frac{\partial^2 \tilde{E}_j}{\partial x_j \partial x_i} - \frac{1}{\tilde{E}_i} \delta_{ij} \frac{\partial^2 \tilde{E}_j}{\partial x_l \partial x_l} \right) = - \frac{1}{f(t)} \frac{d^2 f(t)}{dt^2} = \omega^2 \quad (2.17)$$

A la vista de (2.17), la interpretación física de la constante  $\omega^2$  parece evidente: la dependencia temporal del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  puede expandirse en **modos armónicos**<sup>12</sup> de **frecuencia**  $\omega$ . Habida cuenta de que es posible efectuar el mismo tipo de separación para el campo  $\mathbf{H}$ , llegamos finalmente a las expresiones (2.18) y (2.19), que, pese a la ausencia de tildes, deben entenderse como relativas sólo a la parte espacial de los campos.

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{E} \quad (2.18)$$

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)} \nabla \times \mathbf{H} \right) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H} \quad (2.19)$$

Parecería entonces que podríamos limitarnos a resolver<sup>13</sup> un **problema vectorial de autovalores** sobre el campo de nuestra elección y utilizar después las relaciones (2.11) y (2.13) para calcular el otro. Sin embargo, no conviene olvidar que cualquier campo electromagnético con sentido físico debe cumplir todas las ecuaciones de Maxwell, es decir, también debe ser solución de (2.10) y (2.12). Esta restricción excluye a

<sup>11</sup>Con el fin de conseguir una notación compacta que haga patente la validez del procedimiento de separación de variables, se ha introducido la expresión general para el “elemento de matriz” en la parte izquierda de (2.14), haciendo uso del **convenio de Einstein** para las sumas sobre todas las variables espaciales. El símbolo  $\delta_{ij}$  representa la bien conocida **delta de Kronecker**.

<sup>12</sup>La forma funcional de  $f(t)$  consistiría en una combinación lineal de senos y cosenos que verificara las condiciones iniciales de nuestro problema. Sin embargo, es práctica común introducir la dependencia temporal como una fase, de modo que  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r})e^{i\omega t}$ . Este artificio tiene como consecuencia que la parte espacial del campo eléctrico se convierta a su vez en una cantidad compleja, pero para mantener su sentido físico bastará con que nos limitemos a considerar la parte real.

<sup>13</sup>En el caso más general, de forma autoconsistente.

todos los autovalores **no transversales**<sup>14</sup> de (2.18) y (2.19), si bien tampoco supone un gran problema práctico, ya que, tal y como se detallará en el Capítulo 3, siempre nos será posible imponer *a priori* la transversalidad de las soluciones.

### 2.2.1. Estructura de bandas

Desde el comienzo de este capítulo, venimos repitiendo que los cristales fotónicos se caracterizan por la variación periódica de su índice de refracción. ¿Qué aporta, pues, la **periodicidad**, o lo que es lo mismo, la invariancia del sistema bajo traslaciones primitivas, a la resolución de las ecuaciones (2.18) y (2.19)? Ni más ni menos que permitirnos introducir la “versión electromagnética” del **Teorema de Bloch**:

**Teorema de Bloch.** *Si  $\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \varepsilon(\mathbf{r})$  para todo vector  $\mathbf{R}$  de una **Red de Bravais**, es posible expresar las autofunciones de (2.18) y (2.19) como el producto de una onda plana por una función vectorial que posea la periodicidad de la red cristalina:*

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.20)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.21)$$

donde  $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  y  $\mathbf{v}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  satisfacen

$$\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

$$\mathbf{v}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \mathbf{v}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

Este resultado, cuya demostración formal se pospondrá hasta el Capítulo 4, es análogo al de los electrones sometidos a un potencial periódico y admite una interpretación netamente operativa: es posible *etiquetar* las soluciones de nuestro problema por medio de dos índices, uno escalar  $n$  y el otro vectorial  $\mathbf{k}$ . El primero las ordena según el valor creciente de sus autovalores, mientras que el segundo nos informa de sus propiedades bajo las traslaciones de la red de Bravais del sistema. De hecho, cualquier solución con un  $\mathbf{k}$  arbitrario puede identificarse con otra dentro de la Primera Zona de Brillouin (1ª ZB), de modo que el problema de autovalores queda reducido al cálculo de una **estructura de bandas** a lo largo de las direcciones de alta simetría en la **parte irreducible** de la 1ª ZB, conforme a las convenciones habituales en la física de la materia condensada<sup>15</sup>.

<sup>14</sup>Es decir, con divergencia no nula. Evidentemente, en el caso del campo eléctrico, la transversalidad debe exigirse a  $\varepsilon\mathbf{E}$ .

<sup>15</sup>Véanse, por ejemplo, las referencias [Ashcroft76] y [Kittel95].

Pero antes de mostrar una estructura de bandas, debemos decir algo sobre una de las propiedades más características de los problemas electromagnéticos: la **escalabilidad** de las soluciones, es decir, la posibilidad de establecer una relación directa entre problemas que sólo difieren en una contracción o expansión de su escala de longitudes:

Imaginemos resueltas las ecuaciones (2.18) y (2.19) para una determinada configuración de la función dieléctrica  $\varepsilon(\mathbf{r})$  y tratemos de averiguar en qué se diferenciarían sus soluciones del caso en el que se hubiera empleado  $\varepsilon'(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}/\alpha)$ , es decir, la misma función, pero comprimida o expandida según un parámetro  $\alpha$ . Como primer paso, transformaremos (2.18) y (2.19) introduciendo el cambio de variable  $\mathbf{r}' = \alpha\mathbf{r}$ :

$$\frac{\alpha}{\varepsilon(\mathbf{r}'/\alpha)} \nabla' \times (\alpha \nabla' \times \mathbf{E}(\mathbf{r}'/\alpha)) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}'/\alpha) \quad (2.24)$$

$$\alpha \nabla' \times \left( \frac{\alpha}{\varepsilon(\mathbf{r}'/\alpha)} \nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/\alpha) \right) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/\alpha) \quad (2.25)$$

Dado que según nuestra anterior definición  $\varepsilon(\mathbf{r}'/\alpha) = \varepsilon'(\mathbf{r}')$ , no tenemos más que reagrupar los parámetros para obtener

$$\frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}')} \nabla' \times (\nabla' \times \mathbf{E}(\mathbf{r}'/\alpha)) = \left(\frac{\omega}{\alpha c}\right)^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}'/\alpha) \quad (2.26)$$

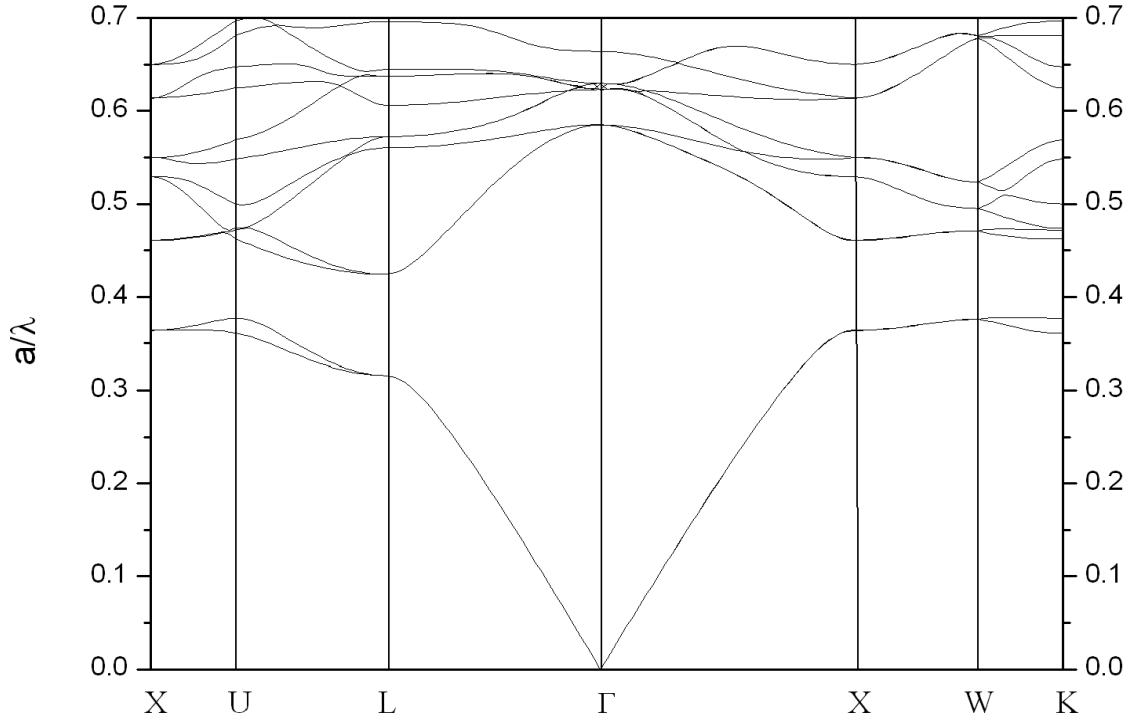
$$\nabla' \times \left( \frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}')} \nabla' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/\alpha) \right) = \left(\frac{\omega}{\alpha c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}'/\alpha) \quad (2.27)$$

con lo que ya no queda más que introducir los “autoestados escalados”  $\mathbf{E}'$  y  $\mathbf{H}'$  y recuperar formalmente (2.18) y (2.19)... con unos nuevos autovalores  $\omega' = \omega/\alpha$ . En definitiva, un cambio en la escala de longitudes se traduce en una simple modificación de la escala de energía de los autovalores, sin introducir ninguna otra diferencia significativa en la física del problema, ya que los autoestados de ambas configuraciones mantienen una **relación de semejanza**<sup>16</sup>.

Esta propiedad resulta muy útil al permitir, por ejemplo, ensayar en la escala de microondas las configuraciones de dispositivos que se quieren operar en el infrarrojo. Por otra parte, como el valor del parámetro  $\alpha$  bien puede ser  $1/a$ , introduce además una diferencia clave con respecto a los cristales electrónicos, al privar al parámetro de red  $a$  de su carácter de **longitud fundamental**. Sin embargo, no conviene perder de vista que todo lo dicho se limita a los casos en los que se cumple la relación

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{r}, \omega/\alpha) \quad (2.28)$$

<sup>16</sup>En el sentido matemático del término.



**Figura 2.5 :** Estructura de bandas fotónicas a lo largo de las direcciones de alta simetría de la Primera Zona de Brillouin, calculada para una red diamante de esferas de aire rodeadas por un material dieléctrico con  $\varepsilon = 12$  y un factor de llenado del 50 %. Los valores de la energía se representan en unidades reducidas adimensionales.

ya que de no ser así la solución autoconsistente de las ecuaciones proporcionaría unos resultados cualitativamente distintos. En todo caso, existe un gran número de materiales dieléctricos que sí verifican (2.28) en un rango lo suficientemente amplio.

Cuando se encuentra presente, la escalabilidad también nos permite utilizar **unidades reducidas** para la energía. Suponiendo que  $\alpha = 1/a$ , los autovalores de las ecuaciones vendrán dados en unidades de  $\omega a/c$ . Basta con añadir el factor  $2\pi$  que reconcilia a  $\omega$  con su habitual significado de velocidad angular para darnos cuenta de que los autovalores de nuestro sistema se pueden expresar en unas nuevas unidades sin dimensiones por medio de las cuales es posible relacionar directamente la longitud característica del mismo con la del campo incidente, haciendo innecesaria la repetición del cálculo para cada posible configuración:

$$\frac{\omega a}{c} \rightarrow \frac{\omega a}{2\pi c} = \frac{a}{\lambda} \quad (2.29)$$

Y es en esas unidades en las que se representan las bandas de la Fig. 2.5, que nos sirven para poner fin a este apartado.

### 2.2.2. Sistemas Finitos

Después de haber estudiado con detalle las ventajas de la periodicidad para la resolución de las ecuaciones de Maxwell, el siguiente paso ha de ser sin duda preguntarnos cómo es posible conjugar semejantes condiciones de contorno con las aplicaciones prácticas en sistemas reales de las que venimos hablando desde el principio del capítulo. . . sobre todo si tenemos en cuenta que, en un sentido estricto, sólo los **sistemas infinitos** pueden ser periódicos. Puesto que, por razones obvias, ese no puede ser el caso, deberemos adoptar un punto de vista más laxo en el que “infinito” venga a querer decir “lo suficientemente grande” y arreglárnoslas para conseguir recuperar las propiedades de los sistemas infinitos con otros que no lo son, una vez que hayamos determinado<sup>17</sup> cuánto deben extenderse en el espacio para que podamos ignorar el efecto de sus fronteras.

#### Sistemas periódicos en el plano

Como un primer paso, consideraremos el caso de un sistema periódico en dos direcciones del espacio, pero **finito** en la tercera. Aunque a primera vista pueda parecer un supuesto excesivamente académico, su interés práctico está más que justificado: en cualquier experimento real se dispone de un cristal fotónico, más o menos grande, pero en todo caso, finito, sobre el que se hace incidir un haz luminoso más o menos colimado que atraviesa una superficie de discontinuidad, por lo general correspondiente a uno de los planos de alta simetría de la estructura en cuestión. No es difícil entender que si el tamaño de la superficie de la muestra es mucho mayor que la sección del haz incidente, la asunción de condiciones periódicas de contorno en el plano está más que justificada, de forma que el parámetro más relevante a la hora de estudiar la respuesta óptica del sistema sea su longitud  $L$  en la dirección normal a la superficie de discontinuidad.

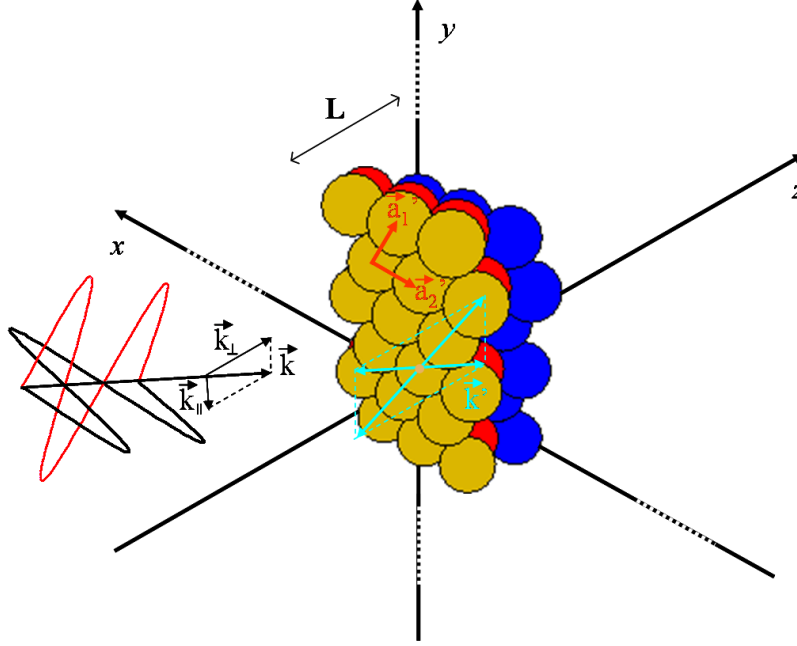
Para establecer de forma clara los conceptos, empecemos por un sistema rigurosamente periódico (y por tanto, infinito), que cumple la hipótesis del Teorema de Bloch para una determinada Red de Bravais. De acuerdo con su definición, todo vector  $\mathbf{R}$  puede expresarse como la suma de un número entero de veces los vectores de la base, es decir

$$\mathbf{R} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 \quad m_i \in \mathbb{N} \quad (2.30)$$

---

<sup>17</sup>Por lo general, de forma empírica





**Figura 2.6 :** Representación esquemática del proceso de esparcimiento de una onda plana por una estructura fcc de esferas con su superficie orientada en la dirección (111). Para mayor claridad, la dirección normal al plano de discontinuidad se ha tomado como eje  $z$ . Se entiende que dicha estructura es periódica en  $xy$ , pero finita y con espesor  $L$  en la dirección  $z$ . Junto a la dirección  $\mathbf{k}$  del campo incidente se muestran otras varias  $\mathbf{k}'$  de las posibles ondas esparcidas.

Nada nos impide, sin embargo, efectuar un cambio de base y encontrar unos nuevos vectores  $\{\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3\}$  que también verifiquen (2.30) y además cumplan dos requisitos adicionales:

1. Dado un determinado vector unitario  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{a}'_1 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{a}'_2 = 0$ .
2. Los vectores  $\{\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2\}$  son base de una Red de Bravais 2D sobre el plano  $\{\mathbf{n}\}$ .

Por medio de esta nueva base, podemos interpretar el cristal fotónico tridimensional como la sucesión de infinitos planos normales a la dirección  $\mathbf{n}$ , separados por un vector de traslación primitiva  $\mathbf{a}'_3$ . Supongamos ahora que restringimos los valores permitidos de  $m'_3$ , de modo que  $m'_3 = 0, 1, 2, \dots, N$ . Nuestro sistema continuaría entonces siendo infinito y periódico en el plano normal a  $\mathbf{n}$ , pero se convertiría en finito en la dirección perpendicular a la superficie de discontinuidad, con un espesor  $L$  correspondiente a  $N$  distancias interplanares.

Y una vez definida la configuración de nuestro sistema “real”, nos toca resolver el problema del **esparcimiento** (o por decirlo en términos más usuales, del *scattering*) de una onda plana que incida oblicuamente sobre la superficie de discontinuidad entre el cristal fotónico y el aire, tal y como se muestra en el ejemplo de la Fig. 2.6, referido a la cara  $\{111\}$  de una estructura de esferas con ordenación fcc.

El campo esparcido por el cristal fotónico puede expresarse como una suma sobre todas las posibles direcciones, es decir

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{E}_{sc}^{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (2.31)$$

Si el proceso de scattering para la onda plana que incide con momento  $\mathbf{k}$  es completamente **coherente**<sup>18</sup>, la conservación de la frecuencia impone

$$|\mathbf{k}'| = \frac{\omega}{c} = |\mathbf{k}| \quad (2.32)$$

para las ondas esparcidas, lo cual reduce a dos el número de grados de libertad del **vector de onda  $\mathbf{k}'$** . Definiendo  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  como la componente de  $\mathbf{k}'$  contenida en el plano de discontinuidad (en nuestro ejemplo, el  $xy$ ), la expresión de (2.31) se convierte en

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} [\mathbf{E}_{sc}]_{\mathbf{k}'_{\parallel}}^{\pm} e^{i\left(\mathbf{k}'_{\parallel}^x, \mathbf{k}'_{\parallel}^y, \pm\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \mathbf{k}'_{\parallel}^2}\right) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.33)$$

Por otro lado, la periodicidad de la estructura en el plano  $xy$  nos aporta el último ingrediente para la determinación de  $\mathbf{k}'$ , que no es otro que la **condición de von Laue**<sup>19</sup> para la interferencia constructiva de las ondas esparcidas,

$$\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g} \quad (2.34)$$

donde  $\mathbf{g}$  es un vector de la **red recíproca** a la definida por  $\{\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2\}$  y  $\mathbf{k}_{\parallel}$  el análogo a  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  para la onda incidente. Con todo lo cual llegamos, finalmente, a la expresión definitiva para el campo esparcido por la estructura:

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} [\mathbf{E}_{sc}]_{\mathbf{g}}^{\pm} e^{i\left((\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^x, (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^y, \pm\sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{g})^2}\right) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.35)$$

<sup>18</sup>Entendiendo por tal aquel en el que las ondas esparcidas tienen la misma frecuencia que la incidente.

<sup>19</sup>Véanse, una vez más, las referencias [Ashcroft76] y [Kittel95].

Dado que, en todo caso, siempre es posible escribir  $\mathbf{k}_{\parallel}$  como la suma de un  $\mathbf{k}_{\parallel}^{ZB}$  contenido dentro de la primera Zona de Brillouin de la red 2D y un vector de red recíproca  $\mathbf{g}'$ , resulta útil definir un nuevo vector de onda  $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^{\pm}$  con el fin de conseguir una notación más compacta, siguiendo el ejemplo de [Pendry74] y [Stefanou92]:

$$\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^{\pm} = \left( (\mathbf{k}_{\parallel}^{ZB} + \mathbf{g})^x, (\mathbf{k}_{\parallel}^{ZB} + \mathbf{g})^y, \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\mathbf{k}_{\parallel}^{ZB} + \mathbf{g})^2} \right) \quad (2.36)$$

Así, las expresiones para los campos incidente y esparcido toman ahora la forma

$$\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}, t) = [\mathbf{E}_{inc}]_{\mathbf{g}'}^{+} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}'}^{+} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega t} \quad (2.37)$$

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{g}''=\mathbf{g}+\mathbf{g}'} [\mathbf{E}_{sc}]_{\mathbf{g}''}^{\pm} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}''}^{\pm} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega t} \quad (2.38)$$

en la que, además de recuperar la dependencia temporal de  $\mathbf{E}$ , se respeta el sistema de referencia de la Fig. 2.6 para que la onda incidente viaje en el sentido positivo del eje  $z$ .

Ya por último, y con vistas a la introducción de **relaciones energéticas** en la superficie de discontinuidad, será conveniente que reescribamos (2.38) en función del lado de la misma en el que nos encontremos. Diremos entonces que en la región  $z < 0$  coexisten el campo incidente de (2.37) junto a un **campo reflejado** (esparcido “hacia fuera”) dado por

$$\mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{g}''} [\mathbf{E}_{ref}]_{\mathbf{g}''}^{-} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}''}^{-} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega t} \quad (2.39)$$

con

$$[\mathbf{E}_{ref}]_{\mathbf{g}''}^{-} \equiv [\mathbf{E}_{sc}]_{\mathbf{g}''}^{-} \quad (2.40)$$

mientras que dentro del cristal fotónico ( $z > 0$ ) sólo consideraremos un único **campo transmitido**, suma del incidente con el esparcido “hacia dentro”

$$\mathbf{E}_{trans}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{g}''} [\mathbf{E}_{trans}]_{\mathbf{g}''}^{+} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}''}^{+} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega t} \quad (2.41)$$

donde

$$[\mathbf{E}_{trans}]_{\mathbf{g}''}^{+} \equiv [\mathbf{E}_{inc}]_{\mathbf{g}'}^{+} \delta_{\mathbf{g}'\mathbf{g}''} + [\mathbf{E}_{sc}]_{\mathbf{g}''}^{+} \quad (2.42)$$

(Es inmediato encontrar expresiones análogas para los campos  $\mathbf{H}_{inc}$ ,  $\mathbf{H}_{ref}$  y  $\mathbf{H}_{trans}$ )

Los **coeficientes de reflexión y de transmisión**, también llamados **reflectancia** ( $R$ ) y **transmitancia** ( $T$ ), se definen como los cocientes entre los promedios temporales del flujo de energía de los campos reflejado o transmitido y el incidente en la superficie

de discontinuidad,<sup>20</sup> que denotaremos por  $A$ . Dicho flujo está determinado por la componente normal del **vector de Poynting** correspondiente a cada uno de los campos incidente, reflejado y transmitido:

$$R^\omega \equiv \frac{\int_A dA \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{S}_{ref}(\mathbf{r}) \rangle^\omega}{\int_A dA \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle^\omega} \quad (2.43)$$

$$T^\omega \equiv \frac{\int_A dA \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{S}_{trans}(\mathbf{r}) \rangle^\omega}{\int_A dA \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{S}_{inc}(\mathbf{r}) \rangle^\omega} \quad (2.44)$$

donde

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{c}{4\pi} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \quad (2.45)$$

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle^\omega \equiv \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) dt \quad (2.46)$$

Hay que señalar que las expresiones (2.43) y (2.44) tienen un carácter completamente general, por lo que, en principio, también deberían tener en cuenta las **componentes evanescentes** del campo esparcido, confinadas a la superficie de discontinuidad y con decaimiento exponencial a ambos lados de la misma. Para recuperar la interpretación física habitual de  $R$  y  $T$  como, respectivamente, el porcentaje de la energía incidente “devuelto” por el sistema y el que se propaga a través del mismo,<sup>21</sup> debemos imponer la restricción adicional de incluir sólo las **soluciones propagantes**, es decir las que verifican

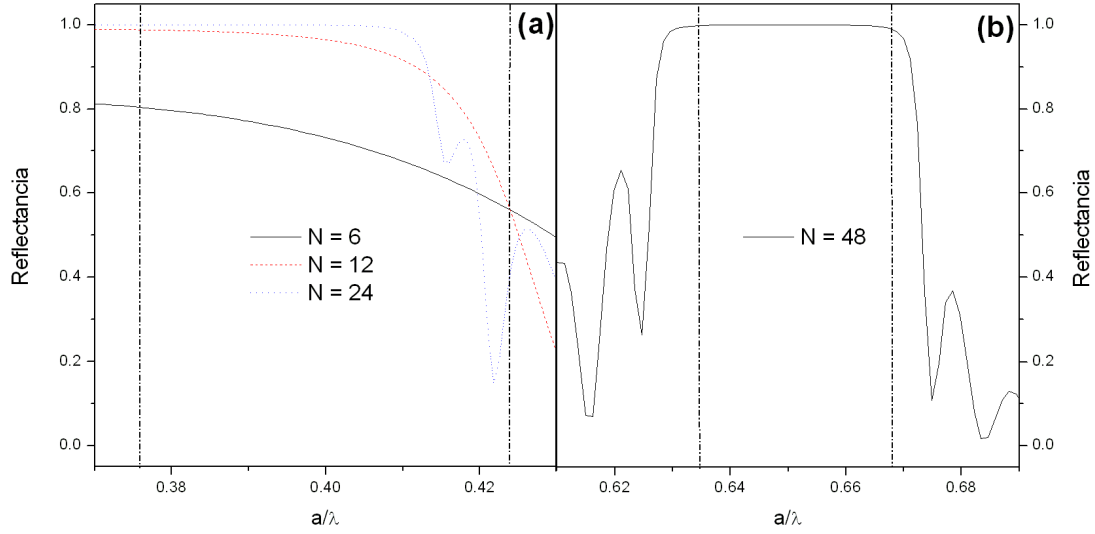
$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\mathbf{k}_\parallel^{ZB} + \mathbf{g}'')^2 > 0 \quad (2.47)$$

Esta condición sobre  $(\mathbf{K}_{\mathbf{g}''}^\pm)^z$  se traduce en que, para valores pequeños de  $\omega$ , la única contribución propagante del campo esparcido es precisamente aquella con  $g'' = 0$ , situación que se conoce habitualmente como **esparcimiento especular** o **esparcimiento Bragg de orden cero**.

La representación gráfica de  $R$  o  $T$  frente a  $\omega$  recibe el nombre de **espectro de reflectancia o transmitancia** y guarda una estrecha relación con la información que nos proporcionan las estructuras de bandas descritas en el apartado anterior. Cuando un

<sup>20</sup>En la Fig. 2.6, el plano  $z = 0$ . Nótese que, en todo caso, la periodicidad nos permite restringir la integración a una celda unidad.

<sup>21</sup>Bajo las hipótesis de nuestro desarrollo,  $R + T = 1$ . Cuando se consideren procesos de esparcimiento más complejos, resultará conveniente definir un **coeficiente de absorción**  $U = 1 - T - R$



**Figura 2.7 :** (a) Espectros de reflectancia correspondientes al sistema descrito en la Fig. 2.5, calculados para distinto número de capas a lo largo de la dirección (111). Las líneas verticales discontinuas indican los bordes del gap completo presente en dicha estructura. Puede observarse que  $R \approx 1$  dentro de dicho intervalo de frecuencias para un número  $N$  de capas superior a 24. (b) Espectro de reflectancia en incidencia normal sobre la superficie  $\{111\}$  calculado para una estructura fcc compacta de esferas de  $\text{SiO}_2$ , suponiendo  $N = 48$ . La ausencia de estados con  $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0}$  en el intervalo  $[0.635, 0.669]$  (líneas verticales) se traduce en la aparición de un máximo en el espectro. Los valores de la energía han de entenderse en todo caso como expresados en unidades reducidas adimensionales.

sistema presenta un gap completo en un rango de frecuencias  $[\omega_1, \omega_2]$ , debe cumplirse

$$\forall \omega \in [\omega_1, \omega_2] : \quad \lim_{L \rightarrow \infty} R(\omega) = 1; \quad \lim_{L \rightarrow \infty} T(\omega) = 0 \quad (2.48)$$

sea cual sea la dirección  $\mathbf{n}$  en la que se haya roto la periodicidad, al no existir ninguna solución para las ecuaciones de Maxwell dentro de dicho intervalo. Esto permite efectuar un ajuste empírico de la mínima dimensión que debe tener nuestro sistema en la dirección de discontinuidad para considerar que sus propiedades se aproximan a las del cristal infinito. Y tal y como se muestra en la Fig. 2.7a, el número de distancias interplanares requerido no tiene por qué ser excesivamente grande.

Así pues, la primera conclusión fundamental de este apartado es que **la presencia de un gap completo debe corresponderse con la aparición de un máximo (mínimo) en los espectros de reflectancia (transmitancia)**. La pregunta obvia es, por lo tanto, qué podemos saber *a priori* de los espectros del sistema cuando ese no sea el caso. Lamentablemente, no demasiado.

Supongamos que una onda plana con una frecuencia  $\omega$  lo suficientemente pequeña como para descartar la presencia de más de un orden Bragg incide normalmente sobre la superficie del sistema representado en la Fig. 2.6. De acuerdo con nuestras anteriores consideraciones sobre el tamaño “infinito” del cristal, es razonable suponer que, en cualquier punto lo suficientemente alejado de su(s) superficie(s), la parte espacial del campo transmitido puede expresarse como una superposición de las autofunciones del problema tridimensional con autovalor  $\omega$  que, además, verifiquen la condición de conservación de la componente tangencial de  $\mathbf{k}$ , en este caso

$$\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{0} \quad (2.49)$$

No es difícil darse cuenta de que las autofunciones que satisfacen esa última condición son precisamente aquellas cuyo vector de onda se encuentra contenido en el segmento  $\overline{\Gamma K_n}$ , siendo  $\mathbf{k}_{K_n}$  el vector paralelo a  $n$  de mayor módulo dentro de la primera Zona de Brillouin 3D, lo cual limita la búsqueda de posibles contribuciones a una única dirección dentro de la estructura de bandas. Siendo esto así, bien pudiera darse el caso de que para ese concreto valor de  $\omega$  no hubiera ninguna autofunción “disponible”, circunstancia que se traduciría en la aparición de un máximo o mínimo espectral<sup>22</sup> como el que se muestra en la parte derecha de la Fig. 2.7.

Por desgracia, si el campo tiene una cierta componente en otra dirección o la frecuencia es lo suficientemente alta como para permitir más de un  $\mathbf{k}'$  para cada  $\omega$ , la interpretación de los espectros se complica notablemente, haciéndose necesaria la utilización de herramientas más sofisticadas que la mera inspección de las bandas para establecer la existencia de alguna solución compatible con un determinado  $\mathbf{k}$  incidente,<sup>23</sup> por no hablar de los efectos asociados a la simetría que se introducirán en el Capítulo 4. En todo caso, y habida cuenta de que el desarrollo de una teoría fenomenológica del transporte en los cristales fotónicos no es uno de los objetivos de esta tesis, nos bastará con tener presente una segunda conclusión fundamental, complementaria de la primera, que podríamos formular así: **la presencia de un máximo (mínimo) en los espectros de reflectancia (transmitancia), no tiene por qué corresponderse necesariamente con la existencia de un pseudogap en la estructura de bandas del cristal infinito.**

---

<sup>22</sup>Es entonces cuando se dice que el sistema presenta un **pseudogap** en un cierto intervalo  $[\omega'_1, \omega'_2]$  a lo largo de la dirección  $\overline{\Gamma K_n}$

<sup>23</sup>En [Yamamoto02] puede encontrarse una excelente discusión al respecto.

### Sistemas estrictamente finitos

A pesar de nuestros anteriores argumentos de plausibilidad acerca de lo razonable de asumir condiciones de contorno periódicas sobre la superficie de discontinuidad para los sistemas finitos, no debemos olvidar que, en un sentido estricto, los sistemas reales no son periódicos (infinitos) en ninguna dirección. Entonces, ¿cómo estar seguros de que podemos aplicar el modelo descrito en el apartado anterior a un sistema concreto?

La electrodinámica clásica<sup>24</sup> nos dice que a una distancia de los centros de scattering lo suficientemente grande como para considerarlos un “todo” (aproximación de **campo lejano**), el campo esparcido puede aproximarse por su **expansión asintótica** en la forma

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{f}(\Omega) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r}; \quad r \rightarrow \infty \quad (2.50)$$

$$\mathbf{H}_{sc}(\mathbf{r}) \approx \hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_{sc}(\mathbf{r}); \quad r \rightarrow \infty \quad (2.51)$$

donde  $\Omega \equiv (\theta, \phi)$  y  $\mathbf{f}(\Omega)$  es la llamada **amplitud de scattering**, que a su vez se relaciona con la **sección eficaz de esparcimiento** por medio de la expresión (2.52), teniendo en cuenta que dicha sección eficaz debe entenderse aquí como la relación entre la potencia reemitida por el sistema en una determinada dirección dentro del ángulo sólido  $d\Omega$  y la intensidad de la radiación incidente.

$$\frac{d\sigma^{sc}(\Omega)}{d\Omega} = |\mathbf{f}(\Omega)|^2 \quad (2.52)$$

Así que, en buena ley, deberíamos introducir en (2.43) y (2.44) las expansiones asintóticas de los campos y comparar los resultados con los de un sistema periódico en el plano, para cerciorarnos de la validez de esa aproximación. Pues bien, por decepcionante que parezca, el cálculo de la amplitud de esparcimiento en el caso general de un conjunto finito de centros de scattering con simetría arbitraria, situados en posiciones del espacio también arbitrarias, no suele conducir más que a una expresión formal, inabordable tanto analítica como numéricamente.<sup>25</sup> Llegados a un aparente callejón sin salida, y aunque el procedimiento no resulte muy satisfactorio desde el punto de vista conceptual, hemos optado por la comparación sistemática de medidas ópticas realizadas en estructuras “grandes” con los resultados de cálculos en los que se han supuesto condiciones de contorno periódicas sobre la superficie de discontinuidad. Tal y como

---

<sup>24</sup>Véase, por ejemplo, [Jackson75].

<sup>25</sup>Salvo en el caso de un número muy pequeño de centros de scattering con simetría esférica, en el que sí es posible expandir de forma eficaz el campo esparcido en términos de una base de **modos propios** siguiendo la prescripción de [deAbajo99].

se expondrá en los Capítulos 5 y 6, confiamos en haber podido obtener de este modo información relevante sobre la física de diversos sistemas de interés.

### 2.3. Sistemas reales

Una importante conclusión de lo expuesto en la sección anterior es que si queremos incluir dentro de los cristales fotónicos a sistemas que no sean estrictamente infinitos, debemos suavizar la condición de invariancia bajo traslaciones primitivas que aparecía en el enunciado del Teorema de Bloch y permitir que no se verifique necesariamente para todos los puntos del espacio ni para cualquier vector de red. Pues bien, el último escalón del descenso que venimos realizando desde los sistemas ideales a la más modesta realidad es asumir no sólo que la condición no se cumpla más que en unos determinados puntos del espacio, sino que en éstos lo haga además **en una forma aproximada**.

Tal y como puede apreciarse a simple vista, la distribución de material dieléctrico dentro de cada uno de los dominios que constituyen los sistemas de la Fig. 2.3 no es completamente uniforme, como tampoco pueden serlo (al menos más allá de un cierto límite) su tamaño, su geometría o sus posiciones relativas. ¿Significa eso que todo nuestro esfuerzo ha sido inútil? Como el lector puede suponer, la respuesta a esa pregunta es que suele ser posible alcanzar un compromiso entre las propiedades ópticas deseadas y las limitaciones técnicas en la construcción de los cristales, si bien es cierto que la influencia de las diferentes clases de defectos<sup>26</sup> siempre ha de ser tomada en cuenta de forma cuidadosa a la hora de interpretar los resultados experimentales. Aunque ese tipo de estudios no constituya en modo alguno el objeto de la presente tesis doctoral, el trabajo de otros autores sí nos permite establecer algunas conclusiones generales al respecto:

- Las consecuencias sobre las propiedades ópticas de los sistemas bidimensionales, dependen fuertemente del tipo de defecto, de la polarización del campo y del mecanismo de formación de los gaps.<sup>27</sup>
- En los sistemas 3D con un gap completo a la altura del primer pseudogap (red diamante o similar), el factor crítico es la conexión entre las regiones con mayor índice de refracción. De garantizarse ésta, el gap se conserva incluso con un número relativamente elevado de defectos.<sup>28</sup>

---

<sup>26</sup>**Polidispersión** o **deformación** de los elementos de scattering, **vacantes** o **dislocaciones** en la red, **defectos de apilamiento**, **rugosidad** de las superficies de discontinuidad etc.

<sup>27</sup>Cfr. [Asatryan99], [Lidorikis00], [Li00a] y [Asatryan00].

<sup>28</sup>Cfr. [Fan95], [Chutinan99a], [Sigalas99] y [Chutinan99b].



- Las estructuras de **ópalo inverso**, con el gap entre la octava y la novena banda, son extremadamente sensibles a la presencia de defectos,<sup>29</sup> si bien algunos de ellos (defectos de apilamiento) no tienen apenas influencia en la respuesta óptica.<sup>30</sup>

En todo caso, cuanto mayor sea nuestro sistema, mayor será la probabilidad de introducir en él alguno de los defectos mencionados, lo cuál redundaría<sup>31</sup> en una disminución de sus propiedades fotónicas. Por contra, en un cristal “perfecto” pero con dimensiones mucho más reducidas, serían los fenómenos de **difracción en los bordes** los que tendrían esa misma consecuencia indeseada. Y es el enunciado de este “problema filosófico” el que nos abre las puertas de los dos enfoques posibles a la hora de diseñar y construir cristales fotónicos: la **micro-fabricación** y el **auto-ensamblaje**.

### 2.3.1. Técnicas de micro-fabricación: la calidad ante todo

Como su propio nombre indica, estas técnicas abordan el problema de la fabricación de los cristales fotónicos desde la perspectiva de su **construcción directa**, esto es, “pegar, cortar y hacer agujeros” en el material hasta conseguir una determinada configuración periódica que nos garantice la no propagación del campo electromagnético en un cierto intervalo espectral, habitualmente el infrarrojo intermedio y cercano (longitudes de onda de 6 a  $0.75 \mu m$ ) utilizado en las comunicaciones ópticas. Recurriendo a la jerga de los dispositivos electrónicos, podríamos decir que esta vía supone de una aproximación “top-bottom” al problema, dado que parte de “piezas” más grandes que la estructura final, para luego ir reduciéndolas cuidadosamente.<sup>32</sup>

La principal ventaja de tal planteamiento radica en la gran calidad de las muestras, así como en la libertad en el diseño de estructuras que, sin necesidad de limitarse a las que ya se encuentran en la naturaleza,<sup>33</sup> pueden llegar a ser tan sofisticadas como los de la Fig. 2.8. Las técnicas de micro-fabricación deben hacer frente, sin embargo, a un problema nada trivial: la enorme cantidad de tiempo y dinero que es preciso invertir hasta lograr una muestra tridimensional lo suficientemente grande como para proporcionar una respuesta óptica de calidad, algo de lo que pueden presumir muy pocos de los grupos que trabajan en esta línea<sup>34</sup> y que, al menos por ahora, hipoteca cualquier posibilidad de convertir estos sistemas en una alternativa real a los actuales dispositivos.

---

<sup>29</sup>Cfr. [Li00b]

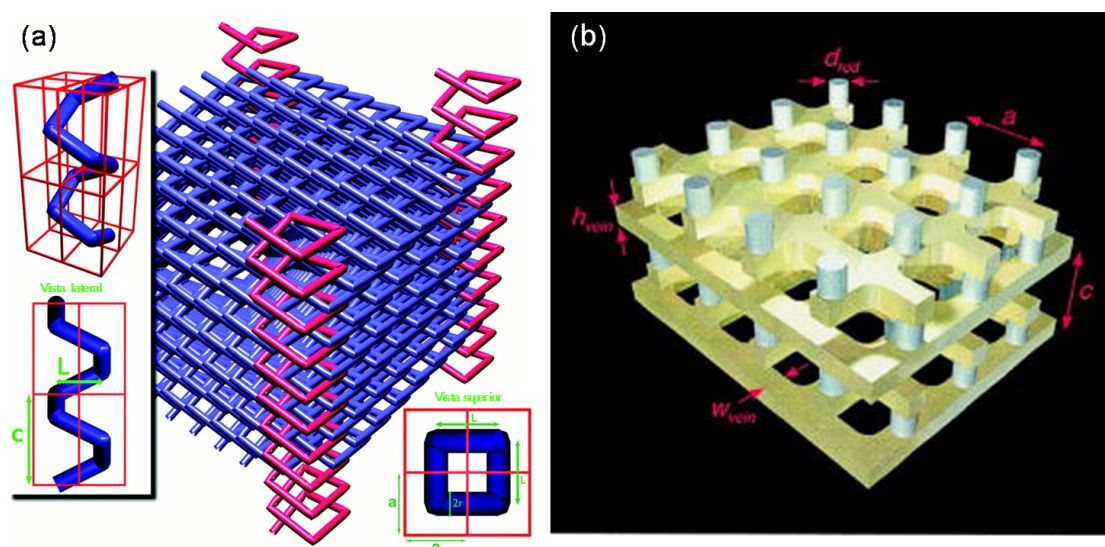
<sup>30</sup>Cfr. [Yannopapas01].

<sup>31</sup>Con carácter general, aunque habría que precisar el tipo de “interacción” entre los defectos.

<sup>32</sup>De hecho, y según se detallará en la sección 2.4, el progreso de la micro-fabricación puede definirse como el avance desde lo grande hacia lo pequeño incluso desde un punto de vista histórico.

<sup>33</sup>Habitualmente, las que constituyen la configuración de mínima energía de sus componentes.

<sup>34</sup>En realidad, sólo los autores de las referencias [Lin98] y [Noda00]



**Figura 2.8 :** (a) Reelaboración de la Fig. 1 en [Toader01]. Propuesta de cristal fotónico compuesto por espirales cuadradas dispuestas según una red tetragonal. (b) Reproducción de la Fig. 1 en [Roundy03]. Propuesta de estructura “layer-by-layer” con un gap completo de anchura cercana al 20 % de su frecuencia central.

Hasta el momento presente, las vías exploradas por los partidarios del “hágalo usted mismo” para ir conformando estructuras periódicas tridimensionales, entendidas siempre como una sucesión de planos perpendiculares a la dirección de discontinuidad, pueden separarse en dos categorías: las que se valen de las técnicas de crecimiento en 2D desarrolladas por la industria de semiconductores,<sup>35</sup> añadiéndoles ingeniosos protocolos<sup>36</sup> para minimizar los errores de alineamiento entre las capas, y las que dan al proceso un enfoque completamente tridimensional, recurriendo a procedimientos tan exóticos como la **manipulación mediante microrobots**,<sup>37</sup> la **litografía holográfica**<sup>38</sup> o la **deposición química en ángulo oblicuo**<sup>39</sup> de los componentes del sistema.

### 2.3.2. Sistemas auto-ensamblados: cuando el tamaño sí importa

Ya hemos descrito cómo las técnicas de micro-fabricación persiguen imponer a la función dieléctrica un determinado patrón de periodicidad. Podemos entonces plantearnos si no sería mucho más fácil hacer justo lo contrario, es decir, aprovechar las configura-

<sup>35</sup>Cfr. [Fan94]

<sup>36</sup>Véanse, por ejemplo, [Fleming99] y [Noda99]

<sup>37</sup>Cfr. [García-Santamaría02] y [Aoki02]

<sup>38</sup>Cfr. [Campbell00] y [Sharp02]

<sup>39</sup>Cfr. [Toader01] y [Kennedy02]

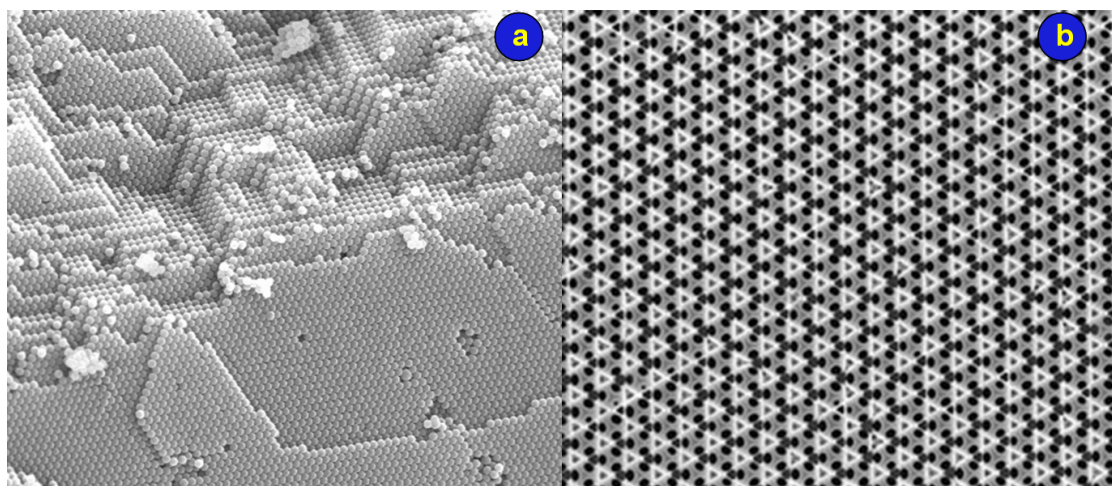
ciones periódicas que un sistema pudiera adoptar por sí mismo, sin necesidad de nuestra intervención. Esa es precisamente, la esencia de un proceso de auto-ensamblaje: ciertos “bloques de construcción” (moléculas u otros objetos de tamaño **mesoscópico**) se auto-ordenan espontáneamente hasta constituir una estructura relativamente estable<sup>40</sup> que minimiza la energía debida a la interacción entre sus componentes y presenta con mucha frecuencia **orden a larga distancia**. Y puesto que son factores como la forma, topología o propiedades superficiales de dichos “bloques” los que gobiernan la evolución del auto-ensamblaje, el resultado último de dicha organización espontánea estará determinado en todo caso por las características individuales de los constituyentes.

Como es lógico, la naturaleza intrínsecamente paralela de este proceso lo convierte en un excelente candidato para la producción masiva de estructuras periódicas, al unir a la velocidad y el bajo coste la posibilidad de obtener muestras tan grandes como se deseen. No obstante, en lo que a la producción de cristales fotónicos se refiere, las aproximaciones auto-organizativas tampoco están libres de varias limitaciones de cierta gravedad. En primer lugar, tal y como se apuntaba en la sección anterior, son mucho más proclives a la introducción de defectos que puedan comprometer las propiedades fotónicas del sistema. Por otro lado, los procesos de auto-ensamblaje suelen darse entre “bloques” con un contraste de índices por debajo del que permitiría la aparición de un gap completo. Y aunque tal inconveniente pudiera solucionarse a través de las llamadas **estructuras inversas**,<sup>41</sup> existe aún otra limitación de carácter más básico: el tipo de configuraciones geométricas que son favorables energéticamente no coincide con las que poseen unas propiedades fotónicas más interesantes. Sin embargo, y pese a todas estas limitaciones, nadie pone en duda que el progreso de los cristales fotónicos pasa por los sistemas auto-ensamblados, precisamente por las razones de tipo económico ya mencionadas. Es esta última consideración, unida al hecho de que nuestro propio trabajo se ha centrado en el estudio teórico de dichas estructuras, el que nos ha decidido a incorporar aquí una breve descripción cualitativa de los principales tipos de cristales fotónicos auto-ensamblados desde el punto de vista de la ciencia de materiales.

---

<sup>40</sup>De hecho, la idea básica del auto-ensamblaje es que la estructura final se encuentre en un estado de equilibrio termodinámico, o en uno muy próximo a él.

<sup>41</sup>Entendiendo por tales aquellas en las que el sistema auto-ensamblado se utiliza como “negativo” del resultado final.



**Figura 2.9 :** (a) Reelaboración de la Fig. 1 en [López99]. Imagen SEM de un ópalo artificial formado por esferas de 440 nm de diámetro. Los planos  $\{111\}$  pueden apreciarse con claridad en la parte inferior, mientras que en los escalones y terrazas de la muestra resultan visibles las zonas con orientaciones  $\{100\}$  y  $\{110\}$ . (b) Reelaboración de la Fig. 2e en [Vlasov01]. Imagen SEM de la cara  $\{111\}$  de un ópalo inverso de silicio, en la que queda patente su extraordinaria perfección estructural.

### Ópalos artificiales

Desde que fue posible demostrar, tanto desde un punto de vista teórico como experimental,<sup>42</sup> que el proceso natural de **sedimentación por gravedad**<sup>43</sup> de una suspensión coloidal de nanopartículas esféricas de  $\text{SiO}_2$  conduce<sup>44</sup> a la estructura de la Fig. 2.9a, compuesta por sucesivos planos de esferas a lo largo de la dirección  $(111)$  de una red fcc, este tipo de sistemas, estrechamente emparentados con la gema del mismo nombre que se utiliza en joyería, han sido objeto de un intenso estudio por parte de la “comunidad fotónica”. El origen de este interés radica en que, si bien el bajo contraste (1.5 : 1) entre los índices de refracción no permite la aparición de un gap completo en los **ópalos desnudos**,<sup>45</sup> resulta relativamente sencillo utilizarlos como punto de partida para la fabricación de ópalos inversos<sup>46</sup> que, como ya quedó patente en [Busch98], sí presentan dicha propiedad a partir de un cociente entre índices superior a 2.9, pudiendo alcanzar el intervalo de frecuencias prohibidas una anchura en torno al 10 % .

<sup>42</sup>Cfr. [Woodcock97] y [Míguez97], respectivamente.

<sup>43</sup>Los detalles del procedimiento experimental pueden encontrarse en [Mayoral97]

<sup>44</sup>Siempre que el diámetro de las esferas no exceda las 0.5 micras. Para asegurar la ordenación cristalina por encima de esa cifra debe recurrirse al **control electroforético** de la sedimentación, tal y como se describe en [Holgado99]

<sup>45</sup>Nombre usual de estas redes de esferas de  $\text{SiO}_2$  en aire, una vez sometidas al proceso de **sinterización** que les proporciona su característica estabilidad mecánica

<sup>46</sup>Véanse los ejemplos descritos en [Blanco00], [Blanco01], [Míguez01a], [Míguez01b] y [Juárez02].

Sin embargo, los cristales así obtenidos no están aún lo suficientemente libres de defectos como para proporcionar una respuesta óptica de calidad óptima, por lo que se hace necesario recurrir al denominado **auto-ensamblaje convectivo**,<sup>47</sup> en el que las **fuerzas de adhesión capilar** desempeñan un papel fundamental. Gracias al uso de esta técnica, es posible obtener estructuras tan perfectas como las de la Fig. 2.9b, lo que abre las puertas de modo definitivo a la fabricación masiva de estructuras fotónicas en tres dimensiones.

### Copolímeros en bloque

Como es bien sabido, los **polímeros** son sustancias cuyas moléculas están constituidas por la repetición de otras unidades estructurales de bajo peso molecular a las que se denomina **monómeros**. Y hablaremos de un **copolímero** cuando al menos dos tipos de monómeros se unan para formar una cadena polimérica. Entre las varias maneras en las que esto puede suceder, resulta bastante frecuente la situación en la que todos los monómeros del mismo tipo se encuentran agrupados entre sí: esos son precisamente los compuestos conocidos como **copolímeros en bloque**. Imaginemos ahora un **sistema binario**, formado por dos monómeros *A* y *B*. Este tipo de materiales presenta la interesante propiedad de auto-organizarse de modo supramolecular,<sup>48</sup> adoptando conformaciones espaciales controladas por la curvatura media de las superficies internas de separación entre sus dos componentes, lo cual convierte a los copolímeros en bloque en excelentes candidatos para la fabricación de cristales fotónicos, habida cuenta de que dichas superficies pueden unirse para formar estructuras periódicas tridimensionales.

Lamentablemente, esas expectativas aún no se han visto confirmadas por la realidad: en julio de 1999 fue publicado un trabajo<sup>49</sup> en el que se estudiaban de modo exhaustivo las condiciones de aparición de un gap completo para las geometrías de la Fig. 2.10, precisamente las que se dan con mayor frecuencia entre los compuestos binarios. De él se deduce que sólo en los casos **(b)** y **(c)** cabe esperar la apertura de un gap completo, y eso a partir de contrastes superiores a 2 y 2.5, respectivamente. Pese a ciertos avances en sistemas uni- y bidimensionales,<sup>50</sup> el logro de semejante umbral de contraste ha constituido hasta la fecha un obstáculo insalvable, ya que tanto *A* como *B* suelen ser moléculas orgánicas con aproximadamente el mismo índice de refracción. Así pues, la realidad presente de los copolímeros no invita al optimismo en lo que a las aplicaciones

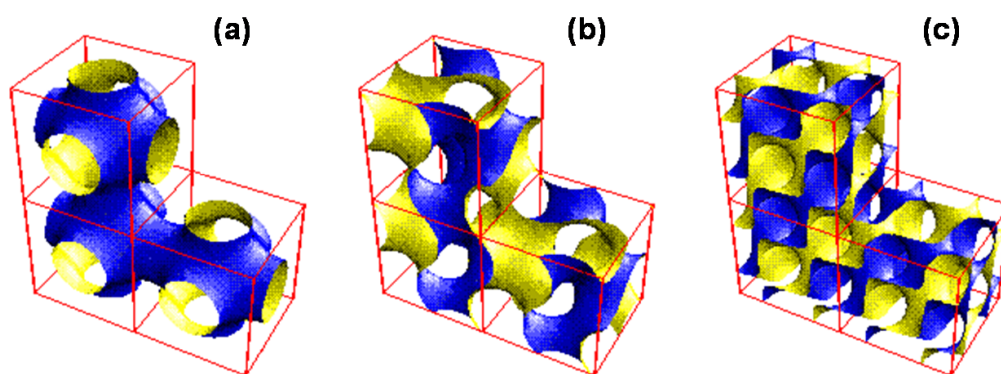
---

<sup>47</sup>Véanse [Velev97] y [Jiang99]

<sup>48</sup>En [Jenekhe98] puede encontrarse la descripción del proceso para un caso particular.

<sup>49</sup>Cfr. [Martín-Moreno99]

<sup>50</sup>Cfr. [Fink99], [Urbas00] y [Edrington01]



**Figura 2.10** : Representación gráfica de tres celdas unidad para cada uno de los siguientes tipos de superficies minimales triplemente periódicas: **(a)** cúbica simple **(b)** giroide y **(c)** doble diamante. (Reelaborado a partir de la Fig. 1 en [Martín-Moreno99])

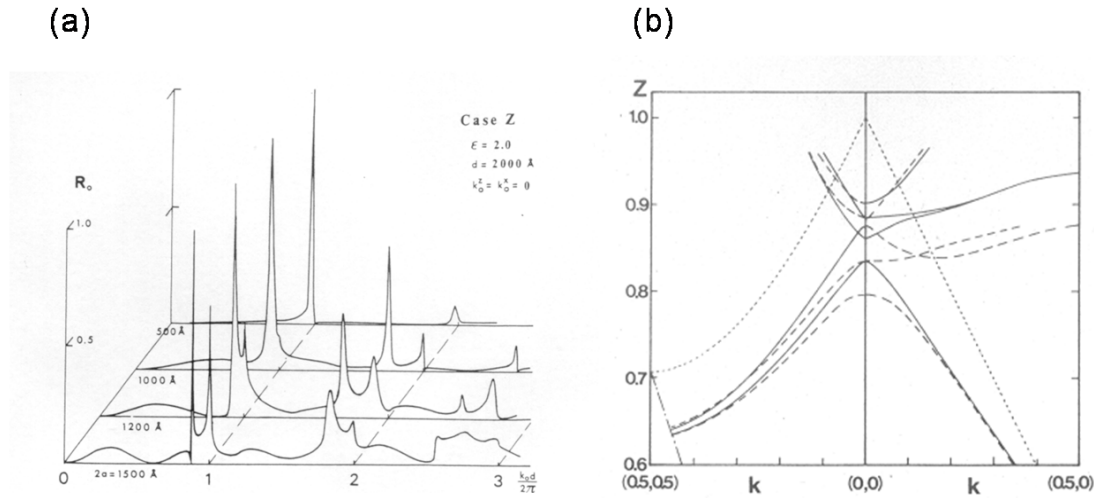
fotónicas se refiere, si bien no debe descartarse que todos los problemas terminen siendo superados por los continuos avances de la ciencia de materiales.

### Auto-ensamblaje orientado

De una forma muy breve, no podemos dejar de consignar una última aproximación que, al tiempo que intenta aprovechar las ventajas de las estrategias auto-organizativas, se aproxima en cierta medida a las técnicas de micro-fabricación. Recibe el nombre genérico de **auto-ensamblaje orientado** y consiste en la modificación del proceso de auto-ensamblaje de las partículas en un coloide por medio de procedimientos tales como el crecimiento sobre superficies corrugadas de acuerdo a una determinada dirección cristalina, la modificación de la concentración iónica en el dispersante o la aplicación de campos eléctricos oscilantes de baja frecuencia.<sup>51</sup> Mediante todos estos “trucos” se ha conseguido el crecimiento de estructuras fcc fuera de la dirección (111), así como con otras geometrías, lográndose incluso inducir transiciones estructurales mediante la aplicación de campos eléctricos en ciertos sistemas.<sup>52</sup> En cualquier caso, tales procedimientos están limitados a suspensiones con muy baja concentración en las que la interacción entre partículas está fuertemente mediada por el dispersante, por lo que, al menos a corto plazo, tampoco parece que puedan aportar soluciones con aplicación tecnológica.

<sup>51</sup>Véanse [vanBlaaderen97], [Yethiraj03] y [Dassanayake00], respectivamente.

<sup>52</sup>El lector interesado puede encontrar una buena revisión de todos estos trabajos en la referencia [vanBlaaderen01]



**Figura 2.11 :** (a) Reproducción de la Fig. 2 en [Ohtaka79b]. Cálculo de la reflectancia especular de un plano de cilindros dieléctricos. (b) Reproducción de las Fig. 3 en [Inoue83]. Cálculo de la estructura de bandas correspondiente a un plano de esferas dieléctricas dispuestas en una red cuadrada.

## 2.4. Apuntes cronológicos

A la hora de establecer el origen conceptual de los cristales fotónicos, es práctica habitual en la literatura científica remitirse a dos trabajos, [Yablonovitch87] y [John87], aparecidos en mayo y junio de 1987 en la revista *Physical Review Letters*. En el primero de ellos, E. Yablonovitch proponía el ya mencionado efecto de inhibición de la emisión espontánea, mientras que en el segundo, firmado por S. John, se terminaba llegando a los cristales fotónicos al extender conceptos de localización electrónica en sólidos. Pero, sin pretender negar a estos autores el indiscutible mérito que les corresponde, parece necesario señalar que tal atribución sobre la paternidad del concepto no es en realidad correcta, dado que existen publicaciones previas que nos permiten retrotraer ese momento al final de la década de los 70 del pasado siglo.

El 15 de mayo de 1979 apareció publicado en *Physical Review B* un trabajo con el significativo título *Energy band of photons and low-energy photon diffraction*<sup>53</sup>, en el que su autor, K. Ohtaka, presentaba de forma inequívoca la extensión al electromagnetismo de conceptos clave de la física electrónica como “estructura de bandas”, y, no contento con ello, aprovechaba además para poner de manifiesto la importante diferencia concep-

<sup>53</sup>Por analogía con los experimentos de **difracción de electrones de baja energía**(LEED) entonces tan en boga.



tual que representa el carácter vectorial del campo electromagnético y sugerir el método KKR como el más adecuado para efectuar los cálculos, frente a los inconvenientes de la expansión en ondas planas. Para entender la importancia del artículo, baste señalar que estos dos últimos aspectos (carácter vectorial del campo y limitación de las técnicas usuales de ondas planas), no fueron resueltos satisfactoriamente por otros autores hasta más de una década después<sup>54</sup> y provocaron que los primeros cristales fotónicos hubieran de diseñarse “a ciegas”<sup>55</sup> por la falta de un tratamiento teórico adecuado para los campos vectoriales. A este primer trabajo, que se “limita” a exponer el formalismo, le siguieron otros más, fechados entre los años 1979 y 1983,<sup>56</sup> en los que aparecieron publicados los primeros cálculos numéricos de bandas y espectros para sistemas finitos, reproducidos en la Fig. 2.11 por su valor testimonial. Sin embargo, después de 1983, Ohtaka y sus colaboradores abandonaron completamente esta línea de investigación para centrarse en el estudio de la **singularidad de Fermi** en metales<sup>57</sup> y sus logros cayeron rápidamente en el olvido para el resto de la comunidad científica. Pese a los riesgos que siempre implica formular hipótesis sobre un “pasado alternativo”, no parece insensato aventurar que de haberse continuado por ese camino, contando, y quizá aquí esté la clave, con el respaldo de un grupo experimental, la historia de los cristales fotónicos habría sido bien distinta.

En todo caso, cuando Yablonovitch y su grupo inician la carrera hacia el “full photonic bandgap” desde una perspectiva netamente ingenieril, lo hacen ignorando, involuntaria o deliberadamente, todos los trabajos anteriores, hasta el punto de no tener ningún empacho en atribuirse la invención del concepto de “estructura de bandas fotónica” o la extensión de las técnicas del estado sólido al electromagnetismo.<sup>58</sup> Y en el número especial que la revista *Journal of Lighthwave Technology* dedicó a los cristales fotónicos en noviembre de 1999, los editores<sup>59</sup> despachaban la contribución de Ohtaka con una frase desdeñosa en la que sólo se hacía mención al primero de sus trabajos.

Dejando aparte la discusión sobre el origen de su descubrimiento, el desarrollo de los cristales fotónicos se ha venido caracterizando hasta el momento más por la superación de retos tecnológicos que por el logro de avances de tipo fundamental sobre lo establecido en los primeros años noventa. En la Tabla 2.1 se recogen los veinte hitos a mi juicio más significativos del periodo comprendido entre los años 1979 y 2000. Quiero destacar que la lista se cierra con el anuncio de la consecución de un gap completo en el rango

<sup>54</sup>Véanse las referencias [Leung90] y [Zhang90].

<sup>55</sup>Tal y como se relata en [Yablonovitch89].

<sup>56</sup>Cfr. [Ohtaka79b], [Ohtaka80], [Ohtaka82], [Inoue82] y [Inoue83].

<sup>57</sup>El lector interesado puede encontrar una buena muestra de este trabajo en [Ohtaka90].

<sup>58</sup>En [Yablonovitch89] puede leerse *Recently, the idea of photonic band structure has been introduced* con [Yablonovitch87] y [John87] como únicas referencias.

<sup>59</sup>Cfr. [Scherer99] Casualmente, uno de los firmantes era... ¡el mismísimo E. Yablonovitch!



**Tabla 2.1** : Cronología de los hitos más significativos en el campo de los cristales fotónicos entre 1979 y 2000. Las fechas se refieren al momento de su publicación en revistas científicas.

Fecha	Hito	Referencia
mayo 1979	Primera mención de las “bandas fotónicas”. Propuesta de expandir los campos utilizando los modos propios de los centros de esparcimiento.	[Ohtaka79a]
octubre 1979	Primer cálculo del espectro en un sistema finito.	[Ohtaka79b]
abril 1983	Primer cálculo de una estructura de bandas fotónicas.	[Inoue83]
mayo 1987	Propuesta sobre la inhibición de la emisión espontánea en estructuras dieléctricas periódicas.	[Yablonovitch87]
junio 1987	Propuesta sobre la localización de luz en estructuras dieléctricas periódicas levemente desordenadas.	[John87]
octubre 1989	Primeras medidas experimentales en un “cristal”, diseñado por el método de prueba y error.	[Yablonovitch89]
octubre 1990	Confirmación experimental de la inhibición de la emisión espontánea en una estructura dieléctrica ordenada.	[Martorell90]
noviembre 1990	Primeros cálculos PWE que tienen en cuenta el carácter vectorial del campo electromagnético.	[Leung90] [Zhang90] <sup>a</sup>
diciembre 1990	Primera predicción teórica sobre la existencia de gap completo en una estructura antes de su fabricación.	[Ho90]
abril 1991	Observación experimental de la localización de luz en las condiciones propuestas por [John87].	[Genack91]
octubre 1991	Primera demostración experimental de la existencia de un “cristal fotónico” con gap completo.	[Yablonovitch91]
marzo 1992	Primera mención de argumentos de simetría para explicar discrepancias entre espectros y bandas.	[Robertson92]
noviembre 1992	Introducción de la técnica de la Matriz de Transferencia para el cálculo de espectros y bandas fotónicas.	[Pendry92]
junio 1995	Introducción de los métodos FDTD (Orden-N) para el cálculo de bandas fotónicas.	[Chan95]
julio 1995	Introducción de los métodos multipolares para el cálculo de bandas fotónicas.	[Nicolovici95]
septiembre 1995	Justificación rigurosa del papel de la simetría de los autoestados mediante la Teoría de Representaciones. <sup>b</sup>	[Sakoda95]
noviembre 1995	Primera referencia al uso de ópalos artificiales como cristales fotónicos.	[Astratov95]
agosto 1998	Primera estructura de ópalo inverso (esferas de aire en TiO <sub>2</sub> ).	[Wijnhoven98]
enero 1999	Primera estructura con gap completo en 1.3 y 1.5 $\mu\text{m}$ construida mediante técnicas de microfabricación.	[Fleming99]
mayo 2000	Primera estructura con gap completo en 1.5 $\mu\text{m}$ construida mediante técnicas de autoensamblado.	[Blanco00]

<sup>a</sup>En páginas consecutivas del mismo número de la revista *Physical Review Letters*<sup>b</sup>Expuesta con anterioridad de forma un tanto crítica en [Stefanou92].

de las comunicaciones ópticas, y que eso obedece tanto a razones “estéticas” como a la dificultad de valorar objetivamente la repercusión de publicaciones más recientes. Y pese a resultar evidente que en su elaboración se ha dado prioridad a los trabajos más relacionados con la presente tesis doctoral,<sup>60</sup> creo sinceramente que, como señala el dicho popular, si no “están todos los que son”, al menos sí “son todos los que están”, y éstos debieran de bastar para una correcta contextualización de nuestra propia labor.<sup>61</sup> Al lector interesado en más detalles, lo remitimos a [Soukoulis01a], donde podrá encontrar una cronología mucho más exhaustiva de todo el proceso.

## Referencias

- [Adibi02] A. Adibi, A. Scherer y S.-Y. Lin (Eds.). *Photonic Bandgap Materials and Devices. Proceedings of SPIE vol 4655*. SPIE, 2002.
- [Aoki02] K. Aoki, H. T. Miyazaki, H. Hirayama, K. Inoshita, T. Baba, N. Shinya y Y. Aoyagi. *Three-dimensional photonic crystals for optical wavelengths assembled by micromanipulation*. Applied Physics Letters **81** (17), 3122–3124, octubre 2002.
- [Asatryan99] A. A. Asatryan, P. A. Robinson, L. C. Botten, R. C. McPhedran, N. A. Nicorovici y C. M. de Sterke. *Effects of disorder on wave propagation in two-dimensional photonic crystals*. Physical Review E **60** (5), 6118–61127, noviembre 1999.
- [Asatryan00] A. A. Asatryan, P. A. Robinson, L. C. Botten, R. C. McPhedran, N. A. Nicorovici y C. M. de Sterke. *Effects of geometric and refractive index disorder on wave propagation in two-dimensional photonic crystals*. Physical Review E **62** (4), 5711–5720, octubre 2000.
- [Ashcroft76] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt Brace College Publishers, 1976.
- [Astratov95] V. N. Astratov, V. N. Bogomolov, A. A. Kaplyanskii, A. V. Prokofiev, L. A. Samoilovich, S. M. Samoilovich y Y. A. Vlasov.

---

<sup>60</sup>Con la sola excepción de la **localización de luz**, “hermana pobre” de los cristales fotónicos, que se incluye por su interés fundamental pese a no habernos ocupado de ella en absoluto.

<sup>61</sup>Por ese mismo motivo, tampoco se hace ninguna mención a conceptos más o menos relacionados, como los **sistemas plasmónicos**, los “**left-handed materials**”, los **materiales autoguiados** etc.

- Optical spectroscopy of opal matrices with CdS embedded in its pores: Quantum confinement and photonic band gap effects.* II Nuovo Cimento D **17** (11-12), 1349–1354, noviembre 1995.
- [Blanco00] A. Blanco, E. Chomski, S. Grabtchak, M. Ibisate, S. John, S. W. Leonard, C. López, F. Meseguer, H. Míguez, J. P. Mondia, G. A. Ozin, O. Toader y H. M. van Driel. *Large-scale synthesis of a silicon photonic crystal with a complete three-dimensional band-gap near 1.5 micrometres.* Nature **405** (6785), 437–440, mayo 2000.
- [Blanco01] A. Blanco, H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Photonic band gap properties of CdS-in-opal systems.* Applied Physics Letters **78** (21), 3181–3183, mayo 2001.
- [Busch98] K. Busch y S. John. *Photonic band gap formation in certain self-organizing systems.* Physical Review E **58** (3), 3896–3908, septiembre 1998.
- [Busch99] K. Busch y S. John. *Liquid-crystal photonic-band-gap materials: The tunable electromagnetic vacuum.* Physical Review Letters **83** (5), 967–970, agosto 1999.
- [Cabrera93] J. M. Cabrera, F. J. López y F. Agulló. *Óptica Electromagnética. Fundamentos.* Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1993.
- [Campbell00] M. Campbell, D. N. Sharp, M. T. Harrison, R. G. Denning y A. J. Turberfield. *Fabrication of photonic crystals for the visible spectrum by holographic lithography.* Nature **404** (6773), 53–56, marzo 2000.
- [Chan94] C. Chan, S. Datta, K. M. Ho y C. M. Soukoulis. *A7 structure: A family of photonic crystals.* Physical Review B **50** (3), 1988–1991, julio 1994.
- [Chan95] C. T. Chan, Q. L. Yu y K. M. Ho. *Order- $N$  spectral method for electromagnetic waves.* Physical Review B **51** (23), 16635–16642, junio 1995.

- [Chutinan99a] A. Chutinan y S. Noda. *Effects of structural fluctuations on the photonic bandgap during fabrication of a photonic crystal*. Journal of the Optical Society of America B **16** (2), 240–244, febrero 1999.
- [Chutinan99b] A. Chutinan y S. Noda. *Effects of structural fluctuations on the photonic bandgap during fabrication of a photonic crystal: a study of a photonic crystal with a finite number of periods*. Journal of the Optical Society of America B **16** (9), 1398–1402, septiembre 1999.
- [Dassanayake00] U. Dassanayake, S. Fraden y A. van Blaaderen. *Structure of electrorheological fluids*. Journal of Chemical Physics **112** (8), 3851–3858, febrero 2000.
- [deAbajo99] F. J. G. de Abajo. *Multiple scattering of radiation in clusters of dielectrics*. Physical Review B **60** (8), 6086–6102, agosto 1999.
- [Edrington01] A. C. Edrington, A. M. Urbas, P. DeRege, C. X. Chen, T. M. Swager, N. Hadjichristidis, M. Xenidou, L. J. Fetters, J. Joannopoulos, Y. Fink y E. L. Thomas. *Polymer-based photonic crystals*. Advanced Materials **13** (6), 421–425, marzo 2001.
- [Fan94] S. Fan, P. R. Villeneuve, R. D. Meade y J. D. Joannopoulos. *Design of three-dimensional photonic crystals at submicron lengthscales*. Applied Physics Letters **65** (11), 1466–1468, septiembre 1994.
- [Fan95] S. Fan, R. Villeneuve y J. D. Joannopoulos. *Theoretical investigation of fabrication-related disorder on the properties of photonic crystals*. Journal of Applied Physics **78** (3), 1415–1418, agosto 1995.
- [Fink99] Y. Fink, A. M. Urbas, M. G. Bawendi, J. D. Joannopoulos y E. L. Thomas. *Block copolymers as photonic bandgap materials*. Journal of Lightwave Technology **17** (11), 1963–1969, noviembre 1999.

- [Fleming99] J. G. Fleming y S. Y. Lin. *Three-dimensional photonic crystal with a stop band from 1.35 to 1.95  $\mu\text{m}$* . Optics Letters **24** (1), 49–51, enero 1999.
- [García-Santamaría02] F. García-Santamaría, H. Miyazaki, A. Urquía, M. Ibisate, M. Belmonte, N. Shinya, F. Meseguer y C. López. *Nanorobotic manipulation of microspheres for on-chip diamond architectures*. Advanced Materials **14** (16), 1144–1147, agosto 2002.
- [Genack91] A. Z. Genack y N. García. *Observation of photon localization in a three-dimensional disordered system*. Physical Review Letters **66** (16), 2064–2067, abril 1991.
- [Happ00] T. D. Happ, M. Kamp y A. Forchel. *Ridge waveguide lasers with 2D photonic crystals mirrors*. En K. H. Ploog, G. Tranke y G. Weimann (Eds.), *Compound Semiconductors 1999. Proceedings of the Twenty-Sixth International Symposium on Compound Semiconductors*, 411–414. IOP Publishing, Bristol, 2000.
- [Ho90] K. M. Ho, C. T. Chan y C. M. Soukoulis. *Existence of a photonic band gap in periodic dielectric structures*. Physical Review Letters **65** (25), 3152–3155, diciembre 1990.
- [Holgado99] M. Holgado, F. García-Santamaría, A. Blanco, M. Ibisate, A. Cintas, H. Míguez, C. J. Serna, C. Molpeceres, J. Requena, A. Mifsud, F. Meseguer y C. López. *Electrophoretic deposition to control artificial opal growth*. Langmuir **15** (14), 4701–4704, julio 1999.
- [Inoue82] M. Inoue, K. Ohtaka y S. Yanagawa. *Light scattering from macroscopic spherical bodies. II. Reflectivity of light and electromagnetic localized state in a periodic monolayer of dielectric spheres*. Physical Review B **25** (2), 689–699, enero 1982.
- [Inoue83] M. Inoue y K. Ohtaka. *Enhanced Raman scattering by two-dimensional array of polarizable spheres*. Journal of the Physical Society of Japan **52**, 1457–1468, abril 1983.
- [Jackson75] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, New York, 2<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1975.

- [Jenekhe98] S. A. Jenekhe y X. L. Chen. *Self-assembled aggregates of rod-coil block copolymers and their solubilization and encapsulation of fullerenes*. Science **279** (5358), 1903–1907, marzo 1998.
- [Jiang99] P. Jiang, J. F. Bertone, K. S. Hwang y V. L. Colvin. *Single-crystal colloidal multilayers of controlled thickness*. Chemistry of Materials **11** (8), 2132–2140, agosto 1999.
- [Joannopoulos95] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade y J. N. Winn. *Photonic Crystals*. Princeton University Press, Princeton, 1995.
- [John87] S. John. *Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices*. Physical Review Letters **58** (23), 2486–2489, junio 1987.
- [John01] S. John y M. Florescu. *Photonic bandgap materials: towards an all-optical micro-transistor*. Journal of Optics A: Pure and Applied Optics **3** (6), S103–20, noviembre 2001.
- [Juárez02] B. H. Juárez, S. Rubio, J. Sánchez-Dehesa y C. López. *Antimony trisulfide inverted opals: growth, characterization and photonic properties*. Advanced Materials **14** (20), 1486–1490, octubre 2002.
- [Kennedy02] S. R. Kennedy, M. J. Brett, O. Toader y S. John. *Fabrication of tetragonal square spiral photonic crystals*. Nano Letters **2** (1), 59–62, enero 2002.
- [Kittel95] C. Kittel. *Introducción a la Física del Estado Sólido*. Editorial Reverté, Barcelona, 3<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1995.
- [Leung90] K. M. Leung y Y. F. Liu. *Full vector wave calculation of photonic band structures in face-centered cubic dielectric media*. Physical Review Letters **65** (21), 2646–2649, noviembre 1990.
- [Li00a] Z. Y. Li, X. Zhang y Z. Q. Zhang. *Disordered photonic crystals understood by a perturbation formalism*. Physical Review B **61** (23), 15738–15748, junio 2000.

- [Li00b] Z. Y. Li y Z. Q. Zhang. *Fragility of photonic band gaps in inverse-opal photonic crystals*. Physical Review B **62** (3), 1516–1519, julio 2000.
- [Lidorikis00] E. Lidorikis, m. M. Sigalas, E. N. Economou y C. M. Soukoulis. *Gap deformation and classical wave localization in disordered two-dimensional photonic-band-gap materials*. Physical Review B **61** (20), 13458–13464, mayo 2000.
- [Lin98] S. Y. Lin, J. G. Fleming, D. L. Hetherington, B. K. Smith, R. Biswas, K. M. Ho, M. M. Sigalas, W. Zubrzycki, S. R. Kurtz y J. Bur. *A three-dimensional photonic crystal operating at infrared wavelengths*. Nature **394** (6690), 251–253, julio 1998.
- [López99] C. López, A. Blanco, H. Míguez y F. Meseguer. *Photonic crystals for laser action*. Optical Materials **13** (1), 187–192, octubre 1999.
- [Martín-Moreno99] L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal y A. M. Somoza. *Self-assembled triply periodic minimal surfaces as molds for photonic band gap materials*. Physical Review Letters **83** (1), 73–75, julio 1999.
- [Martorell90] J. Martorell y N. M. Lawandy. *Observation of inhibited spontaneous emission in a periodic dielectric structure*. Physical Review Letters **65** (15), 1877–1880, octubre 1990.
- [Mayoral97] R. Mayoral, J. Requena, J. S.Moya, C. López, A. Cintas, H. Míguez, F. Meseguer, L. Vázquez, M. Holgado y A. Blanco. *3D long-range ordering in a SiO<sub>2</sub> submicrometer-sphere sintered superstructure*. Advanced Materials **9** (3), 257–260, febrero 1997.
- [McGurn00] A. R. McGurn. *Photonic crystals circuits: A theory for two- and three-dimensional networks*. Physical Review B **61** (19), 13235–13249, mayo 2000.
- [Meseguer99] F. J. Meseguer, C. López, H. Míguez, J. Requena y J. S. Moya. *Opalos y cristales fotónicos*. Investigación y Ciencia (269), 50–56, febrero 1999.

- [Míguez97] H. Míguez, F. Meseguer, C. López, A. Mifsud, J. S. Moya y L. Vázquez. *Evidence of FCC crystallization of  $\text{SiO}_2$  nanospheres*. Langmuir **13** (23), 6009–6011, noviembre 1997.
- [Míguez01a] H. Míguez, E. Chomski, F. García-Santamaría, M. Ibisate, S. John, C. López, F. Meseguer, J. P. Mondia, G. A. Ozin y H. M. van Driel. *Photonic bandgap engineering in germanium inverse opals by chemical vapour deposition*. Advanced Materials **13** (21), 1634–1637, noviembre 2001.
- [Míguez01b] H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Synthesis and photonic bandgap characterization of polymer inverse opals*. Advanced Materials **13** (6), 393–396, marzo 2001.
- [Nicolrovici95] N. A. Nicolrovici, R. C. McPhedran y L. C. Botten. *Photonic band gaps for arrays of perfectly conducting cylinders*. Physical Review E **52** (1), 1135–1145, julio 1995.
- [Noda99] S. Noda, N. Yamamoto, H. Kobayashi, M. Okano y K. Tomoda. *Optical properties of three-dimensional photonic crystals based on III – V semiconductors at infrared to near-infrared wavelengths*. Applied Physics Letters **75** (7), 905–907, agosto 1999.
- [Noda00] S. Noda, K. Tomoda, N. Yamamoto y A. Chutinan. *Full three-dimensional photonic bandgap crystals at near-infrared wavelengths*. Science **289** (5479), 604–606, julio 2000.
- [Ohtaka79a] K. Ohtaka. *Energy band of photons and low-energy photon diffraction*. Physical Review B **19** (19), 5057–5067, mayo 1979.
- [Ohtaka79b] K. Ohtaka y H. Numata. *Multiple scattering effects in photon diffraction for an array of cylindrical dielectrics*. Physics Letters A **73** (5-6), 411–413, octubre 1979.
- [Ohtaka80] K. Ohtaka. *Scattering theory of low-energy photon diffraction*. Journal of Physics C: Solid State Physics **13** (40), 667–680, febrero 1980.



- [Ohtaka82] K. Ohtaka y M. Inoue. *Light scattering from macroscopic spherical bodies. I. Integrated density of states of transverse electromagnetic fields*. Physical Review B **25** (2), 677–688, enero 1982.
- [Ohtaka90] K. Ohtaka y Y. Tanabe. *Theory of the soft-x-ray edge problem in simple metals: historical survey and recent developments*. Review of Modern Physics **62** (4), 929–991, octubre 1990.
- [Patrini02] M. Patrini, M. Galli, M. Belotti, L. C. Andreani, G. Guizzetti, G. Pucker, A. Lui, P. Bellutti y L. Pavesi. *Optical response of one-dimensional  $(\text{Si}/\text{SiO}_2)_m$  photonic crystals*. Journal of Applied Physics **92** (4), 1816–1820, agosto 2002.
- [Pendry74] J. B. Pendry. *Low Energy Electron Diffraction: The Theory and its Application to Determination of Surface Structure*. Academic Press, London, 1<sup>a</sup> edición., 1974.
- [Pendry92] J. B. Pendry y A. MacKinnon. *Calculation of photon dispersion relations*. Physical Review Letters **69** (19), 2772–2774, noviembre 1992.
- [Robertson92] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe y J. D. Joannopoulos. *Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array*. Physical Review Letters **68** (13), 2023–2026, marzo 1992.
- [Roundy03] D. Roundy y J. Joannopoulos. *Photonic crystal structure with square symmetry within each layer and a three-dimensional band gap*. Applied Physics Letters **82** (22), 3835–3837, junio 2003.
- [Sakoda95] K. Sakoda. *Symmetry, degeneracy and uncoupled modes in two-dimensional photonic lattices*. Physical Review B **52** (11), 7982–7986, septiembre 1995.
- [Sakoda01] K. Sakoda. *Optical Properties of Photonic Crystals*. Springer Verlag, Berlin, 2001.
- [Scherer99] A. Scherer, T. Doll, E. Yablonovitch, H. O. Everitt y J. A. Higgins. *Electromagnetic crystal structures, design, synthesis and applications*. Journal of Lightwave Technology **17** (11), 1928–1929, noviembre 1999.

- [Sharp02] D. N. Sharp, M. Campbell, E. R. Dedman, M. T. Harrison, R. G. Denning y A. J. Turberfield. *Photonic crystals for the visible spectrum by holographic lithography*. Optical and Quantum Electronics **34** (1-3), 3–12, enero 2002.
- [Sigalas99] M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan y K. M. Ho. *Effect of disorder on photonic band gaps*. Physical Review B **59** (20), 12767–12770, mayo 1999.
- [Soukoulis01a] C. M. Soukoulis. *3D photonic crystals: From microwaves to optical frequencies*. En C. M. Soukoulis (Ed.), *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century*, 25–40. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.
- [Soukoulis01b] C. M. Soukoulis (Ed.). *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century. Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Photonic Crystals and Light Localization*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.
- [Stefanou92] N. Stefanou, V. Karathanos y A. Modinos. *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*. Journal of Physics: Condensed Matter **4**, 7389–7400, septiembre 1992.
- [Toader01] O. Toader y S. John. *Proposed square spiral microfabrication architecture for large three-dimensional photonic band gap crystals*. Science **292** (5519), 1133–1135, mayo 2001.
- [Urbas00] A. Urbas, R. Sharp, Y. Fink, E. L. Thomas, M. Xenidou y L. J. Fetters. *Tunable block copolymer/homopolymer photonic crystals*. Advanced Materials **12** (11), 812–814, junio 2000.
- [vanBlaaderen97] A. van Blaaderen, R. Ruel y P. Wiltzius. *Template-directed colloidal crystallization*. Nature **385** (6614), 321–324, enero 1997.
- [vanBlaaderen01] A. van Blaaderen, K. P. Velikov, J. P. Hoogenboom, D. L. J. Vossen, A. Yethiraj, R. Dullens, T. van Dillen y A. Polman. *Manipulating colloidal crystallization for photonic applications: From self-organization to do-it-yourself organization*. En C. M. Soukoulis (Ed.), *Photonic Crystals and Light Localization in the*

- 21st Century*, 239–251. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001.
- [Velev97] O. D. Velev, T. A. Jede, R. F. Lobo y A. M. Lenhoff. *Porous silica via colloidal crystallization*. *Nature* **389** (6650), 447–448, octubre 1997.
- [Vlasov01] Y. A. Vlasov, X. Z. Bo, J. C. Sturm y D. J. Norris. *On-chip natural assembly of silicon photonic bandgap crystals*. *Nature* **414** (6861), 289–293, noviembre 2001.
- [Wijnhoven98] J. E. G. J. Wijnhoven y W. L. Vos. *Preparation of photonic crystals made of air spheres in titania*. *Science* **281** (5378), 802–804, agosto 1998.
- [Woodcock97] L. V. Woodcock. *Entropy difference between the face-centred cubic and hexagonal close-packed crystal structures*. *Nature* **385** (6612), 141–143, enero 1997.
- [Yablonovitch87] E. Yablonovitch. *Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics*. *Physical Review Letters* **58** (20), 2059–2062, mayo 1987.
- [Yablonovitch89] E. Yablonovitch y T. J. Gmitter. *Photonic band structure: The face-centered-cubic case*. *Physical Review Letters* **63** (18), 1950–1953, octubre 1989.
- [Yablonovitch91] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter y K. M. Leung. *Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms*. *Physical Review Letters* **67** (17), 2295–2298, octubre 1991.
- [Yamamoto02] N. Yamamoto y S. Noda. *Accurate identification of the band gap of photonic crystals from transmission spectra*. *Journal of Applied Physics* **92** (5), 2256–2259, septiembre 2002.
- [Yannopapas01] V. Yannopapas, N. Stefanou y A. Modinos. *Effect of stacking faults in the optical properties of inverted opals*. *Physical Review Letters* **86** (21), 4811–4814, mayo 2001.

- [Yethiraj03] A. Yethiraj y A. van Blaaderen. *A colloidal model system with an interaction tunable from hard sphere to soft and dipolar*. Nature **421** (6922), 513–517, enero 2003.
- [Zhang90] Z. Zhang y S. Satpathy. *Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell's equations*. Physical Review Letters **65** (21), 2650–2653, noviembre 1990.

# CAPÍTULO 3

## Métodos de cálculo y modelización

*Dios no se preocupa de nuestras dificultades matemáticas. Él integra a ojo.*

Albert Einstein

En el capítulo anterior presentábamos las herramientas teóricas necesarias para entender las propiedades de los cristales fotónicos. Ahora nos ocuparemos de algo mucho más práctico: cómo implementar el cálculo numérico de bandas y espectros. A tal fin se pasará revista a los métodos disponibles, señalando sus ventajas e inconvenientes y el grado de fiabilidad de los resultados obtenidos con cada uno de ellos.

### Contenido

<b>3.1. Expansión en ondas planas (PWE)</b>	<b>49</b>
<b>3.2. Método de la Matriz de Transferencia (TMM)</b>	<b>52</b>
3.2.1. Obtención de la estructura de bandas	57
3.2.2. Cálculo de espectros de reflectancia y transmitancia	58
3.2.3. Validez de la aproximación	63
<b>3.3. Discretización del dominio temporal (FDTD)</b>	<b>65</b>
3.3.1. Cálculo de bandas y espectros	67
3.3.2. Limitaciones, ventajas e inconvenientes	70
<b>3.4. Expansión en multipolos esféricos (layer-KKR)</b>	<b>72</b>
3.4.1. Cálculo de bandas y espectros	74
3.4.2. Validez de la aproximación	75
<b>3.5. Otros métodos</b>	<b>79</b>
<b>Referencias</b>	<b>80</b>



### 3.1. Expansión en ondas planas (PWE)

Tal y como se expuso en el Capítulo 2, las ecuaciones de Maxwell dentro de un cristal fotónico pueden ser convenientemente reconducidas a un problema vectorial de autovalores, al que se le añade una restricción adicional de transversalidad en las soluciones. Recuperemos entonces la ecuación correspondiente al campo magnético, olvidándonos por un momento de la posible dependencia explícita de  $\varepsilon$  con la frecuencia:

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H} \right) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H} \quad (3.1)$$

De acuerdo con el Teorema de Bloch, las soluciones de (3.1) pueden expresarse como el producto de una fase por una función vectorial periódica, que nada nos impide a su vez desarrollar en la forma de una **serie de Fourier**:

$$\mathbf{H}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{h}_{\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{g} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3.2)$$

Con vistas a que las autofunciones satisfagan *a priori* la ya mencionada condición de transversalidad, resulta particularmente conveniente definir los coeficientes del desarrollo de acuerdo con la siguiente prescripción<sup>1</sup>

$$\mathbf{h}_{\mathbf{g}} = \sum_{\lambda=1}^2 h_{\mathbf{g}\lambda} \hat{\mathbf{e}}_{\lambda} \quad (3.3)$$

en la que los vectores  $\hat{\mathbf{e}}_{\lambda}$  verifican  $\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot (\mathbf{g} + \mathbf{k}) = \hat{\mathbf{e}}_2 \cdot (\mathbf{g} + \mathbf{k}) = 0$ . Gracias a esta elección de la base, todas las soluciones de (3.1) también lo son del conjunto de las ecuaciones de Maxwell, eliminándose así desde un principio los siempre molestos **modos longitudinales**. Ha llegado, pues, el momento de expandir de idéntico modo la función dieléctrica

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}'} \varepsilon(\mathbf{g}') e^{i\mathbf{g}' \cdot \mathbf{r}} \quad (3.4)$$

y sustituir las expresiones (3.2) y (3.4) en la ecuación maestra.

Después de un cierto manejo algebraico, el problema diferencial queda reducido a un sistema de ecuaciones lineales sobre los coeficientes

$$\sum_{\mathbf{g}', \lambda'} M_{\mathbf{g}', \lambda'}^{\mathbf{g}, \lambda} h_{\mathbf{g}' \lambda'} = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 h_{\mathbf{g} \lambda} \quad (3.5)$$

---

<sup>1</sup>Cfr. [Ho90]

que, en principio, puede ser resuelto con cualquiera de las técnicas algebraicas usuales y en el que se ha definido una nueva matriz  $M$  con el objeto de aligerar la notación

$$M_{\mathbf{g}', \lambda'}^{\mathbf{g}, \lambda} = [(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \times \hat{\mathbf{e}}_\lambda] \cdot [(\mathbf{k} + \mathbf{g}') \times \hat{\mathbf{e}}_{\lambda'}] \varepsilon^{-1}(\mathbf{g}' - \mathbf{g}) \quad (3.6)$$

Este resultado, aparecido de forma casi simultánea en las referencias [Zhang90] y [Leung90]<sup>2</sup> y que venía a aprovechar los conocimientos adquiridos en el cálculo de sistemas electrónicos, supuso el inicio de la obtención masiva de estructuras de bandas que caracterizó a la “comunidad fotónica” en la primera mitad de los años noventa del pasado siglo. Sin embargo, y aunque en un primer momento todo parecieran ventajas (claridad conceptual, fácil implementación incluso para el cálculo de espectros en sistemas finitos<sup>3</sup>, libertad para la elección de los vectores base, ausencia de limitaciones geométricas para los centros de esparcimiento etc.) pronto resultó claro que el principal problema de esta técnica residía en su inmenso coste computacional:

Según quedó patente en [Sözüer92], el **número de ondas planas**  $N_{PW}$  incluidas en el desarrollo de (3.2) debe coincidir con el **número de nodos**  $N_{FFT}$  empleado en la discretización de  $\varepsilon(\mathbf{r})$ , ya que en caso de truncamiento de la serie no puede garantizarse la convergencia de las soluciones. Y dado que la resolución de (3.5) obligaría entonces al almacenamiento de  $N_{FFT} \times N_{FFT}$  elementos de matriz y a la realización de otras tantas operaciones de multiplicación vectorial, llegamos a la conclusión de que este enfoque es, al menos con los medios computacionales actuales, bastante incompatible con una descripción detallada de la función dieléctrica.

¿Nos hallamos, pues, ante una limitación insalvable? Como en muchas otras ocasiones, la clave está en contemplar las cosas desde la perspectiva adecuada: no es difícil comprobar que la ecuación (3.1) es expresión de un problema de autovalores **hermítico** y, por lo tanto, susceptible de ser resuelto de acuerdo con un **esquema variacional**, introducido por vez primera en [Meade93]. Sin entrar en más detalles,<sup>4</sup> eso quiere decir que el autoestado de (3.1) con autovalor más bajo **minimiza** el denominado **cociente de Rayleigh** del problema, es decir

$$\left(\frac{\omega_0}{c}\right)^2 = \min \frac{\sum_{\mathbf{g}, \lambda} \sum_{\mathbf{g}', \lambda'} h_{\mathbf{g}\lambda}^* M_{\mathbf{g}', \lambda'}^{\mathbf{g}, \lambda} h_{\mathbf{g}'\lambda'}}{\sum_{\mathbf{g}, \lambda} h_{\mathbf{g}\lambda}^* h_{\mathbf{g}\lambda}} \quad (3.7)$$

pudiéndonos valer además de la **relación de ortogonalidad** entre autoestados de los

<sup>2</sup>Si bien en ambos casos la eliminación de las soluciones no transversales se efectuaba *a posteriori*.

<sup>3</sup>Cfr. [Sakoda95]

<sup>4</sup>Que sí pueden encontrarse en [Arfken95]



problemas hermíticos para obtener seguidamente el resto de soluciones según el orden creciente de sus autovalores. La ventaja computacional de este planteamiento radica en que ya no resulta necesario el almacenamiento de todos los elementos de  $M$ , ni tampoco la evaluación explícita de los múltiples productos matriciales: mediante la mera inspección de la ecuación (3.1) podemos apreciar que las únicas operaciones necesarias para la obtención de los elementos de  $M$  son el cálculo de rotacionales y la división entre la función dieléctrica. Si tenemos en cuenta que cada una de estas operaciones es diagonal en alguno de los dos **espacios duales**, la receta es simple: se toma un vector de prueba<sup>5</sup> en el espacio de Fourier, se calcula su rotacional, se regresa al espacio real para efectuar la división, se transforma otra vez y se vuelve a calcular el rotacional. Gracias a este sencillo esquema iterativo, el principal coste computacional proviene de las sucesivas **transformaciones de Fourier**, por lo que el tiempo de cálculo crece como  $N_{PW} \ln N_{PW}$ . Y puesto que a causa de la ya citada diagonalidad de los operadores las necesidades de almacenamiento escalan como  $N_{PW}$ , es posible alcanzar sin problemas cotas tan elevadas como  $N_{PW} = N_{FFT} \sim 10^6$ , lo que, unido a una apropiada<sup>6</sup> **discretización de la función dieléctrica** en las zonas de discontinuidad, posibilita el estudio de cualquier sistema no disipativo sin dependencia explícita de la energía en su función dieléctrica, por compleja que sea la conformación espacial de ésta.

Por todas las razones mencionadas, la expansión en ondas planas se ha convertido en el método de referencia para el cálculo de estructuras de bandas fotónicas en materiales dieléctricos y en lo que a nosotros respecta, en el único que se ha empleado de forma cotidiana en el transcurso de nuestra investigación.<sup>7</sup> Sin embargo, no conviene dejar de mencionar que la dificultad de implementación de un esquema variacional análogo para los problemas de transporte hace que este método haya caído casi completamente en desuso para el cálculo de espectros en sistemas finitos, en beneficio de las técnicas que se expondrán en las próximas secciones.

Y antes de poner punto final a este apartado, sólo una breve mención a los casos con disipación o dependencia explícita de la frecuencia. Limitándonos a sistemas 2D y más como un ejercicio de virtuosismo que otra cosa, aún es posible recurrir a la PWE para calcular bandas en materiales con una función dieléctrica de tipo plasmónico:

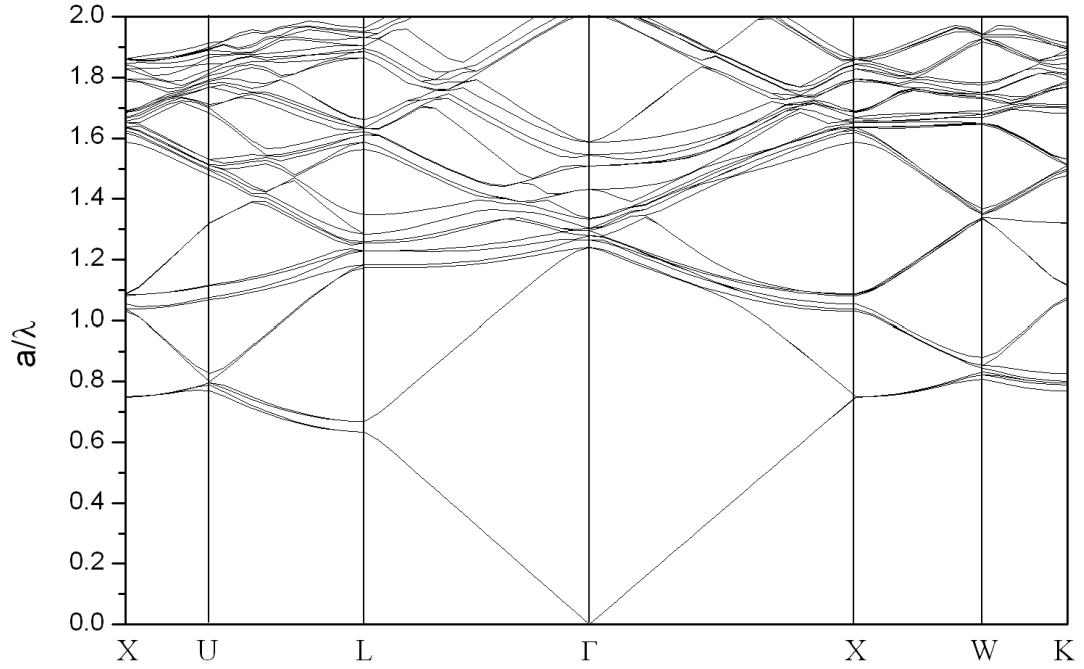
$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (3.8)$$

---

<sup>5</sup>La forma más acertada de escoger dicho vector puede encontrarse en [Johnson01]

<sup>6</sup>Cfr. [Meade93] y [Johnson01]

<sup>7</sup>Fundamentalmente por la posibilidad de obtener de forma gratuita el paquete **MPB**, una implementación multi-plataforma del código utilizado en las referencias [Meade93] y [Johnson01].



**Figura 3.1** : Estructura de bandas fotónicas correspondiente a una red fcc compacta de esferas dieléctricas ( $\varepsilon = 2.104$ ) rodeadas por aire. El cálculo se ha llevado a cabo mediante una implementación iterativa del esquema variacional para la PWE, imponiendo una variación máxima del 0.000001 % en la traza de  $M$  como límite de tolerancia para la convergencia de los autovalores. El número de puntos utilizados para la discretización de  $\varepsilon(\mathbf{r})$  asciende a 40 por cada vector primitivo y los valores de la energía se representan en unidades reducidas adimensionales.

Sin embargo, el carácter no hermítico de dicho problema permite la existencia de autovalores complejos, lo cual añade una dificultad adicional tanto a la obtención como a la interpretación de los resultados, ya que se hace necesario descartar *a posteriori* las soluciones sin sentido físico. Y puesto que tales sistemas no han sido el objeto de nuestro estudio, remitimos al lector a las referencias incluidas al final del capítulo.<sup>8</sup>

### 3.2. Método de la Matriz de Transferencia (TMM)

Con vistas a la exposición de los fundamentos de este método, resulta conveniente recuperar la formulación de las ecuaciones macroscópicas de Maxwell en un sistema sin cargas ni corrientes libres que presentábamos al comienzo del Capítulo 2, pero empleando ahora las unidades del *Sistema Internacional* para una mejor comparación con las

<sup>8</sup>Véanse, por ejemplo [Kuzmiak94], [Kuzmiak97] y [Halevi00]

expresiones que aparecen en los trabajos originales<sup>9</sup> de J. B. Pendry y sus colaboradores, referencia principal y obligada de todo lo expuesto en esta sección:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.9)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (3.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (3.12)$$

Como es de sobra conocido, dada una **curva cerrada simple**  $C$  que defina el contorno de una cierta **superficie abierta bilátera**  $\mathbf{A}$ , es posible utilizar el **Teorema de Stokes** para obtener la versión integral de (3.10) y (3.12), es decir

$$\oint_C \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} \quad (3.13)$$

$$\oint_C \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} \quad (3.14)$$

Serán estas nuevas expresiones las que nos permitirán abordar la **discretización de las ecuaciones de Maxwell** de acuerdo a un esquema de **diferencias finitas**.

Imaginemos una red cristalina como la de la Fig. 3.2 en la que las posiciones de los sitios vinieran determinadas por los vectores

$$\mathbf{R} = n_x a_x \hat{\mathbf{e}}_x + n_y a_y \hat{\mathbf{e}}_y + n_z a_z \hat{\mathbf{e}}_z \quad (3.15)$$

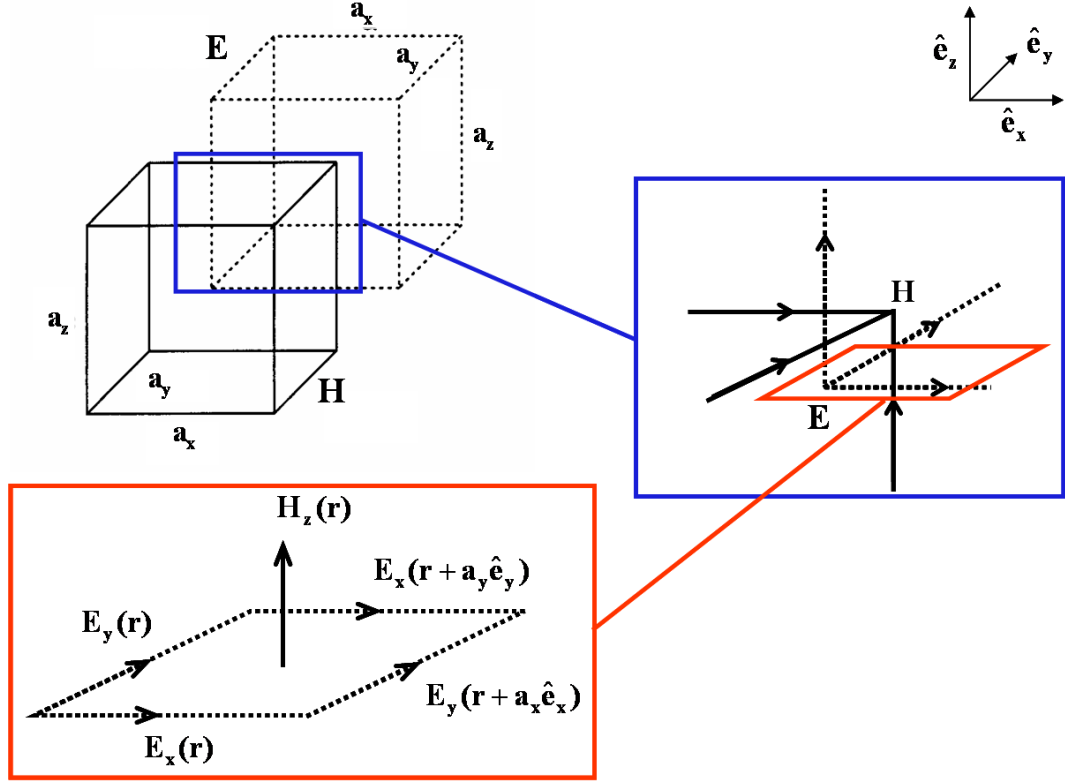
asumiendo que la longitudes de cada uno de los vectores primitivos podría tomar en principio cualquier valor arbitrario. Por razones que quedarán claras a continuación, asignaremos a esta red la etiqueta  $\mathbf{H}$ . Supongamos ahora una segunda red cristalina  $\mathbf{E}$  idéntica a la original, pero desplazada de la anterior según el vector de traslación

$$\mathbf{t} = \frac{1}{2}(a_x \hat{\mathbf{e}}_x + a_y \hat{\mathbf{e}}_y + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \quad (3.16)$$

es decir, la mitad de la longitud de cada uno de los vectores primitivos. Consecuentemente, ambas redes se interpenetrarían en la forma que se muestra en la citada figura. Continuando con el ejercicio de la suposición, nada nos impediría tampoco definir el origen del sistema de referencia de cada una de las redes en el modo indicado en el detalle

---

<sup>9</sup>Cfr. [Pendry92], [Pendry94], [Bell95], [Pendry96] y [Ward96].



**Figura 3.2 :** Representación esquemática del proceso de discretización de las ecuaciones de Maxwell, basada en las ilustraciones del Capítulo 2 de [Ward96].

en azul de la Fig. 3.2. Como el lector ya habrá podido adivinar, nuestro propósito no es otro que identificar las aristas de cada una de las redes con los sucesivos tramos de un contorno de integración para las ecuaciones (3.10) y (3.12) tal y como el que aparece en el detalle en rojo de la misma figura. Si reducimos los valores continuos del campo electromagnético a los de los puntos discretos que constituyen cada red, suponiendo un valor constante en los tramos intermedios,<sup>10</sup> es posible realizar una evaluación directa de (3.10) que pasaría a convertirse en un conjunto de tres ecuaciones discretas que interrelacionarían las componentes de los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  en las dos redes

$$E_y(\mathbf{r}, t)a_y + E_z(\mathbf{r} + a_y\hat{\mathbf{e}}_y, t)a_z - E_y(\mathbf{r} + a_z\hat{\mathbf{e}}_z, t)a_y - E_z(\mathbf{r}, t)a_z = -\frac{\partial}{\partial t}a_ya_zB_x(\mathbf{r}, t) \quad (3.17)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t)a_z + E_x(\mathbf{r} + a_z\hat{\mathbf{e}}_z, t)a_x - E_z(\mathbf{r} + a_x\hat{\mathbf{e}}_x, t)a_z - E_x(\mathbf{r}, t)a_x = -\frac{\partial}{\partial t}a_zaxB_y(\mathbf{r}, t) \quad (3.18)$$

$$E_x(\mathbf{r}, t)a_x + E_y(\mathbf{r} + a_x\hat{\mathbf{e}}_x, t)a_y - E_x(\mathbf{r} + a_y\hat{\mathbf{e}}_y, t)a_x - E_y(\mathbf{r}, t)a_y = -\frac{\partial}{\partial t}a_xayB_z(\mathbf{r}, t) \quad (3.19)$$

<sup>10</sup>Lo cual sólo es estrictamente cierto en el límite diferencial.

mientras que otro conjunto equivalente haría lo propio para  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{H}$ :

$$H_z(\mathbf{r}, t)a_z + H_y(\mathbf{r} - a_z\hat{\mathbf{e}}_z, t)a_y - H_z(\mathbf{r} - a_y\hat{\mathbf{e}}_y, t)a_z - H_y(\mathbf{r}, t)a_y = \frac{\partial}{\partial t}a_ya_zD_x(\mathbf{r}, t) \quad (3.20)$$

$$H_x(\mathbf{r}, t)a_x + H_z(\mathbf{r} - a_x\hat{\mathbf{e}}_x, t)a_z - H_x(\mathbf{r} - a_z\hat{\mathbf{e}}_z, t)a_x - H_z(\mathbf{r}, t)a_z = \frac{\partial}{\partial t}a_za_xD_y(\mathbf{r}, t) \quad (3.21)$$

$$H_y(\mathbf{r}, t)a_y + H_x(\mathbf{r} - a_y\hat{\mathbf{e}}_y, t)a_x - H_y(\mathbf{r} - a_x\hat{\mathbf{e}}_x, t)a_y - H_x(\mathbf{r}, t)a_x = \frac{\partial}{\partial t}a_xa_yD_z(\mathbf{r}, t) \quad (3.22)$$

Incorporando de forma explícita las hipótesis establecidas en el Capítulo 2 sobre las relaciones constitutivas entre campos y la expansión armónica de la dependencia temporal, llegamos finalmente al conjunto de seis ecuaciones acopladas que conectan los valores de cada una de las componentes de los campos eléctrico y magnético con las de los sitios adyacentes.<sup>11</sup>

$$\frac{1}{a_y}[E_z(\mathbf{r} + a_y\hat{\mathbf{e}}_y) - E_z(\mathbf{r})] - \frac{1}{a_z}[E_y(\mathbf{r} + a_z\hat{\mathbf{e}}_z) - E_y(\mathbf{r})] = -i\omega\mu_0H_x(\mathbf{r}) \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{a_z}[E_x(\mathbf{r} + a_z\hat{\mathbf{e}}_z) - E_x(\mathbf{r})] - \frac{1}{a_x}[E_z(\mathbf{r} + a_x\hat{\mathbf{e}}_x) - E_z(\mathbf{r})] = -i\omega\mu_0H_y(\mathbf{r}) \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{a_x}[E_y(\mathbf{r} + a_x\hat{\mathbf{e}}_x) - E_y(\mathbf{r})] - \frac{1}{a_y}[E_x(\mathbf{r} + a_y\hat{\mathbf{e}}_y) - E_x(\mathbf{r})] = -i\omega\mu_0H_z(\mathbf{r}) \quad (3.25)$$

$$\frac{1}{a_y}[H_z(\mathbf{r}) - H_z(\mathbf{r} - a_y\hat{\mathbf{e}}_y)] - \frac{1}{a_z}[H_y(\mathbf{r}) - H_y(\mathbf{r} - a_z\hat{\mathbf{e}}_z)] = i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})E_x(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

$$\frac{1}{a_z}[H_x(\mathbf{r}) - H_x(\mathbf{r} - a_z\hat{\mathbf{e}}_z)] - \frac{1}{a_x}[H_z(\mathbf{r}) - H_z(\mathbf{r} - a_x\hat{\mathbf{e}}_x)] = i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})E_y(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

$$\frac{1}{a_x}[H_y(\mathbf{r}) - H_y(\mathbf{r} - a_x\hat{\mathbf{e}}_x)] - \frac{1}{a_y}[H_x(\mathbf{r}) - H_x(\mathbf{r} - a_y\hat{\mathbf{e}}_y)] = i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})E_z(\mathbf{r}) \quad (3.28)$$

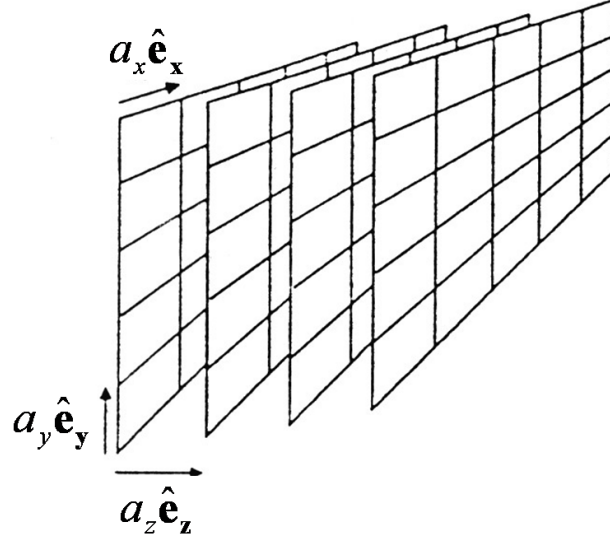
Conviene señalar, no obstante, que esta forma un tanto artificiosa (aunque de gran elegancia formal) de presentar la formulación discreta de las ecuaciones de Maxwell puede considerarse un “arreglo cosmético” *a posteriori* de la deducción original, que pasa por la aproximación directa de las expresiones continuas una vez asegurada la transversalidad de las soluciones.<sup>12</sup> Es precisamente esta aproximación

$$e^{\pm ik_j a_j} \approx 1 \pm ik_j a_j \quad (3.29)$$

la que restringe la validez de todo el desarrollo al límite en el que  $k_j a_j \ll 1$ , según se discutirá al final de la sección.

<sup>11</sup>En ese sentido, es frecuente afirmar que esta discretización de las ecuaciones de Maxwell constituye el análogo de las formulaciones “tight binding” a primeros vecinos de la física del estado sólido.

<sup>12</sup>Cfr. [Pendry92]



**Figura 3.3 :** Representación esquemática del concepto de la matriz de transferencia: los valores del campo electromagnético sobre un plano dado se construyen a partir de los del plano precedente. (Reelaborado a partir de la Fig. 1 en [Pendry94])

Mediante las oportunas sustituciones entre las ecuaciones (3.23)-(3.28) es posible obtener “monstruosas” expresiones explícitas para cada una de las componentes de los campos en la forma  $F_j(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) = F_j(\mathbf{r}) + \dots$  que no incluiremos aquí<sup>13</sup> por no alargar excesivamente nuestra exposición. El propósito de este formalismo queda patente a la vista de la Fig. 3.3: suponiendo conocidos los valores del campo en un cierto punto  $\mathbf{r}$  sobre el plano  $xy$ , queremos obtenerlo en otro  $\mathbf{r}'$  situado en el plano  $z = a_z$ . Como ya se ha señalado anteriormente, las expresiones deducidas a partir de (3.23)-(3.28) nos proporcionan la respuesta deseada en función no sólo de los valores en el punto original sobre  $z = 0$ , sino de los de sus primeros vecinos dentro del mismo plano. Nada nos impide entonces deshacernos de las componentes  $F_z$  para reducir el número de ecuaciones al de variables independientes, planteando formalmente el problema a través de una **matriz de transferencia** que conecta los valores del campo en ambos planos a través de un sumatorio sobre todos los puntos incluidos en la discretización:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \equiv \begin{bmatrix} E_x(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \\ E_y(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \\ H_x(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \\ H_y(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z) \end{bmatrix} = \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{T}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \begin{bmatrix} E_x(\mathbf{r}') \\ E_y(\mathbf{r}') \\ H_x(\mathbf{r}') \\ H_y(\mathbf{r}') \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

<sup>13</sup>Remitimos al lector interesado a las referencias [Pendry94], [Bell95] y [Pendry96]

Naturalmente, la aproximación a primeros vecinos hace que la mayor parte de los elementos de matriz en (3.30) sean ceros, lo cual facilita bastante los procedimientos de cálculo numérico.

### 3.2.1. Obtención de la estructura de bandas

El método descrito para la resolución de las ecuaciones de Maxwell tiene una validez absolutamente general dentro de su rango de aplicación, por lo que también debería servirnos para el caso particular de una estructura periódica:

Imaginemos que un cierto cristal fotónico viene descrito por un conjunto de vectores primitivos  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$  que guardan una relación de proporcionalidad con  $\{a_x \hat{\mathbf{e}}_x, a_y \hat{\mathbf{e}}_y, a_z \hat{\mathbf{e}}_z\}$ , es decir

$$\mathbf{a}_1 = \alpha a_x \hat{\mathbf{e}}_x; \quad \mathbf{a}_2 = \beta a_y \hat{\mathbf{e}}_y \quad \mathbf{a}_3 = \gamma a_z \hat{\mathbf{e}}_z \quad (3.31)$$

Puesto que la matriz de transferencia nos permite conectar los valores de  $\mathbf{F}$  sobre planos sucesivos, y teniendo en cuenta que cada periodo en la dirección  $z$  de la red cristalina incluye  $\gamma$  de los de la red de discretización, podemos expresar el valor del campo en un cierto plano del cristal como el resultado de aplicar  $\gamma$  veces la matriz de transferencia a los valores sobre el plano anterior:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_3) = \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{T}'(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{F}(\mathbf{r}) \equiv \prod_{i=1}^{\gamma} \sum_{\mathbf{r}'} \tilde{T}_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.32)$$

Por otra parte, la periodicidad del sistema nos conduce de nuevo al Teorema de Bloch

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) = e^{i\alpha k_x a_x} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.33)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_2) = e^{i\beta k_y a_y} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.34)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_3) = e^{i\gamma k_z a_z} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (3.35)$$

Así pues, nos encontramos con que las ecuaciones (3.33) y (3.34) fijan las condiciones de contorno del sistema para cada par de valores  $(k_x, k_y)$ , mientras que, por su parte, (3.32) y (3.35) definen completamente un problema de autovalores que nos permite obtener todos los  $k_z$ s compatibles con una  $\omega$  dada. La receta es simple: en primer lugar, se calcula  $\tilde{T}'^\omega$  para, a continuación, determinar los  $k_z$ s correspondientes desechando los asociados a soluciones no propagantes.<sup>14</sup> Repitiendo el proceso para sucesivas frecuencias obtendremos la estructura de bandas  $k_z = k_z(\omega)$ .

<sup>14</sup>Es decir, aquellos que tienen una parte imaginaria.

Este método tiene la indudable ventaja de que permite tratar sistemas cuya función dieléctrica dependa de la frecuencia sin necesidad de introducir ninguna modificación adicional. Sin embargo, también presenta dos serios inconvenientes:

- Su naturaleza  $\omega \rightarrow \mathbf{k}$  no permite explorar la estructura de bandas a lo largo de una dirección arbitraria en el espacio recíproco, a diferencia de las técnicas PWE, paradigma de la filosofía  $\mathbf{k} \rightarrow \omega$ .
- La condición (3.31) provoca **replegamientos** de las bandas en los sistemas con **base no ortogonal**, ya que la empleada en la discretización sí ha de serlo necesariamente. Y aunque eso no supone ningún obstáculo para la determinación del gap completo en un sistema dado, sí representa un obstáculo bastante grave a la hora de intentar relacionar bandas y espectros por encima del orden cero para el espaciamiento Bragg.

En consecuencia, y dado que los sistemas estudiados han sido predominantemente materiales no dispersivos sin dependencia explícita de la frecuencia en su función dieléctrica, no parece que la matriz de transferencia sea la mejor opción a la hora de calcular estructuras de bandas.

### 3.2.2. Cálculo de espectros de reflectancia y transmitancia

Con el objeto de conseguir una notación más compacta, comenzaremos por reescribir la ecuación (3.30): Si en su versión original nos permitía conectar los valores de un campo vectorial  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  con cuatro componentes en dos puntos  $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$  separados por un vector  $a_z \hat{\mathbf{e}}_z$  en función de los valores de dicho campo sobre los  $n_x \times n_y$  puntos de discretización coplanares con  $\mathbf{r}$ , ahora se trata de multiplicar por  $n_x \times n_y$  las dimensiones de cada uno de los objetos involucrados, de modo que  $\mathbf{F}$  pase a contener información sobre los valores del campo en todos y cada uno de los puntos de discretización. Bajo este nuevo enfoque, la única caracterización necesaria de las coordenadas pasa a ser el valor de la componente  $z$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(z + a_z) &\equiv \begin{bmatrix} F_1(z + a_z) \\ \vdots \\ F_{4n_x n_y}(z + a_z) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{T}_{1,1}(z) & \dots & \tilde{T}_{1,4n_x n_y}(z) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{T}_{4n_x n_y,1}(z) & \dots & \tilde{T}_{4n_x n_y,4n_x n_y}(z) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} F_1(z) \\ \vdots \\ F_{4n_x n_y}(z) \end{bmatrix} \\ &\equiv \tilde{T}(z) \mathbf{F}(z) \end{aligned} \quad (3.36)$$



Imaginemos por un momento que el espacio comprendido por y entre dos planos de discretización consecutivos presentara las propiedades del **espacio libre**, es decir  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0$  y  $\mu(\mathbf{r}) = \mu_0$ . En ese caso, la matriz de transferencia no tendría una dependencia explícita con  $z$  y los autovalores de la ecuación (3.36) definirían ondas planas que podríamos etiquetar mediante su correspondiente autovalor  $k_z^j$ , siguiendo la convención introducida en el Capítulo 2. Como el problema no es, en general, hermitico, deberemos distinguir entre los casos de actuación “por la derecha” y “por la izquierda” de la matriz, añadiendo además un superíndice <sup>(0)</sup> para recalcar que nos estamos ocupando del caso homogéneo:

$$\tilde{T}^{(0)} \mathbf{F}_{dra}^{(0)k_z^j}(z) = \mathbf{F}_{dra}^{(0)k_z^j}(z + a_z) = e^{ik_z^j a_z} \mathbf{F}_{dra}^{(0)k_z^j}(z) \quad (3.37)$$

$$\mathbf{F}_{izq}^{(0)k_z^j}(z) \tilde{T}^{(0)} = \mathbf{F}_{izq}^{(0)k_z^j}(z + a_z) = e^{ik_z^j a_z} \mathbf{F}_{izq}^{(0)k_z^j}(z) \quad (3.38)$$

Tras la oportuna normalización a la unidad de los autovectores por la derecha y por la izquierda en la forma

$$\mathbf{F}_{izq}^{(0)k_z^j}(z) \cdot \mathbf{F}_{dra}^{(0)k_z^{j'}}(z) = \delta_{jj'} \quad (3.39)$$

podemos definir<sup>15</sup> una transformación unitaria  $U$  a la base de las ondas planas

$$\tilde{U} = \sum_j \mathbf{F}_{dra}^{(0)k_z^j}(z) \mathbf{F}_{izq}^{(0)k_z^j}(z) \quad (3.40)$$

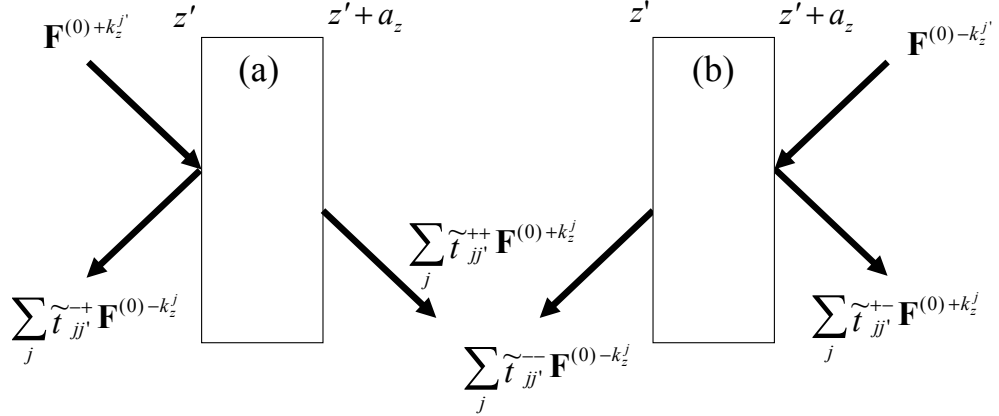
que nos permita diagonalizar la matriz de transferencia homogénea:

$$\tilde{U} \tilde{T}^{(0)} \tilde{U}^{-1} = \begin{pmatrix} e^{ik_z^1 a_z} & \dots & & & \\ \vdots & e^{ik_z^2 a_z} & & & 0 \\ & & \ddots & & \\ & & & e^{-ik_z^1 a_z} & \\ & 0 & & & e^{-ik_z^2 a_z} & \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

Como puede apreciarse, para cada autovalor  $e^{ik_z^j a_z}$  siempre aparece su inverso  $e^{-ik_z^j a_z}$ , correspondiéndose sus autovectores con ondas que se propagan de izquierda a derecha y de derecha a izquierda, respectivamente. Además, la transformación  $U$  tiene la propiedad de ordenar los autovalores según se muestra en (3.41), algo que, como veremos seguidamente, nos resultará de una extraordinaria utilidad.

---

<sup>15</sup>Véase [Pendry94]



**Figura 3.4 :** Representación esquemática del proceso de espacimiento del campo en la celda de discretización para los casos de incidencia izquierda-derecha **(a)** y derecha-izquierda **(b)**.

Regresemos, pues, al caso general en el que la matriz de transferencia depende explícitamente de  $z$  y apliquémosle a su vez la transformación unitaria:

$$\tilde{T}_{PW}(z) \equiv \tilde{U}\tilde{T}(z)\tilde{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{T}^{++}(z) & \tilde{T}^{+-}(z) \\ \tilde{T}^{-+}(z) & \tilde{T}^{--}(z) \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

¿Cuál es el significado físico de las nuevas matrices  $\tilde{T}^{\pm\pm}$  mediante las que hemos expresado la transformada de  $\tilde{T}(z)$ ? Consideremos el caso de una onda plana que viaja libremente por el espacio de izquierda a derecha e incide en la parte izquierda de la celda de discretización, según se muestra en la Fig. 3.4a. Como es sabido, una parte de la misma se transmitirá a través de la celda y el resto se reflejará en sentido opuesto al de la onda incidente:

$$\mathbf{F}^{(0)k_z^{j'}}(z') = \mathbf{F}_{inc}^{(0)k_z^{j'}}(z') + \mathbf{F}_{ref}^{(0)k_z^{j'}}(z') = \mathbf{F}^{(0)+k_z^{j'}}(z') + \sum_j \tilde{t}_{jj'}^{--} \mathbf{F}^{(0)-k_z^j}(z') \quad (3.43)$$

$$\mathbf{F}^{(0)k_z^{j'}}(z' + a_z) = \mathbf{F}_{trans}^{(0)k_z^{j'}}(z' + a_z) = \sum_j \tilde{t}_{jj'}^{++} \mathbf{F}^{(0)+k_z^j}(z' + a_z) \quad (3.44)$$

Si ahora empleamos la ecuación (3.36) para conectar los valores del campo en  $z'$  y  $z' + a_z$ , haciendo uso a su vez de la expresión (3.42), obtendremos la siguiente ecuación matricial:

$$\begin{pmatrix} \tilde{T}^{++}(z) & \tilde{T}^{+-}(z) \\ \tilde{T}^{-+}(z) & \tilde{T}^{--}(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{t}^{-+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{t}^{++} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Empleando el mismo tipo de argumentos, llegaremos a otra ecuación complementaria para el caso en el que la onda viaja de derecha a izquierda e incide en primer lugar sobre la parte derecha de la celda:

$$\begin{pmatrix} \tilde{T}^{++}(z) & \tilde{T}^{+-}(z) \\ \tilde{T}^{-+}(z) & \tilde{T}^{--}(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{t}^{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{t}^{+-} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

A la vista de (3.45) y (3.46), el significado de  $\tilde{T}^{\pm\pm}$  resulta evidente: agrupamos bajo ese nombre a los elementos de matriz que conectan las componentes del campo que se propagan de izquierda a derecha (+) y de derecha a izquierda (-) en  $z = z'$  (superíndice derecho) y  $z = z' + a_z$  (superíndice izquierdo). Y resolviendo el sistema formado por las ecuaciones (3.45) y (3.46) podemos encontrar una expresión explícita que relacione estas matrices con los coeficientes de reflexión y transmisión, objetivo último de todo este laborioso desarrollo:

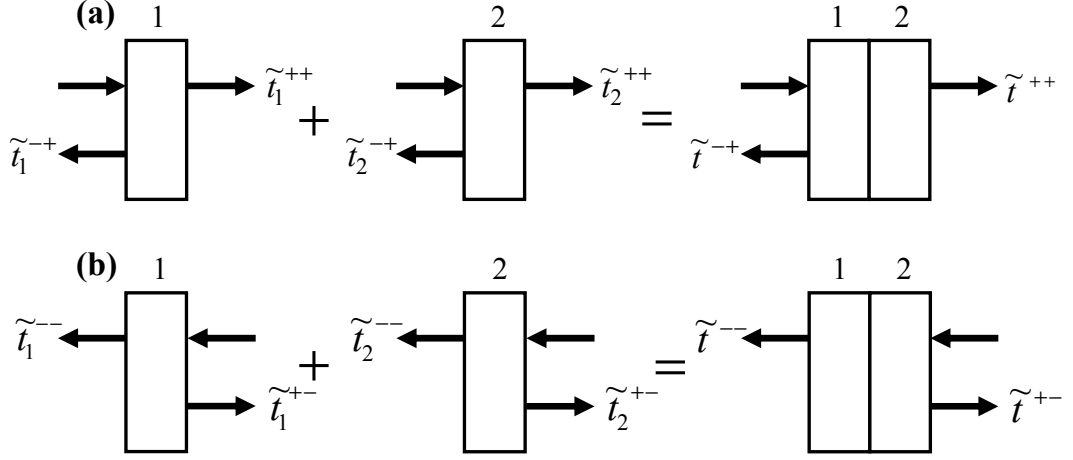
$$\tilde{T}_{PW}(z) = \begin{pmatrix} \tilde{T}^{++}(z) & \tilde{T}^{+-}(z) \\ \tilde{T}^{-+}(z) & \tilde{T}^{--}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{t}^{++} - \tilde{t}^{+-}(\tilde{t}^{--})^{-1}\tilde{t}^{-+} & \tilde{t}^{+-}(\tilde{t}^{--})^{-1} \\ -(\tilde{t}^{--})^{-1}\tilde{t}^{-+} & (\tilde{t}^{--})^{-1} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Naturalmente, como en el caso del cálculo de la estructura de bandas, la extensión al caso de una celda unidad del cristal es inmediata, obteniéndose otra vez la matriz de transferencia total  $\tilde{T}'(z)$  como el producto de las sucesivas  $\tilde{T}_i$ . En resumen: una vez calculada  $\tilde{T}'(z)$ , se procede al cambio de base mediante la transformación  $U$  para extraer seguidamente de los cuadrantes de  $\tilde{T}'_{PW}(z)$  las matrices de reflexión y transmisión, que a su vez nos proporcionarán las tan deseadas  $R(\omega)$  y  $T(\omega)$  al sustituir en (2.43) y (2.44) los valores de los campos<sup>16</sup> de las ecuaciones (3.43) y (3.44) sin necesidad de (¡sólo por esta vez!) tener cuidado con los factores de conversión MKS→CGS.

Esta forma de calcular los espectros posee sin duda grandes virtudes, como el hecho de no estar restringida a ninguna propiedad geométrica de los centros de esparcimiento, permitir cualquier dependencia explícita con la frecuencia de una función dieléctrica en general compleja o poder adaptarse un tamaño arbitrario del sistema en la dirección de discontinuidad. Sin embargo, esta última circunstancia debe manejarse con cuidado para evitar problemas de convergencia numérica. La razón es bien simple: como ya señalamos en su momento, la matriz de transferencia contiene todas las soluciones del problema de autovalores, incluidas también aquellas con  $k_z$  imaginario que prácticamente garanti-

---

<sup>16</sup>Nótese que, al trabajar con una  $\omega$  fija, podemos adoptar el convenio de [Jackson75] y definir el promedio temporal del vector de Poynting como un producto vectorial entre cantidades complejas, concretamente  $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle^\omega = \frac{1}{2} \mathbf{E}_\omega \times \mathbf{H}_\omega^*$



**Figura 3.5 :** Representación esquemática del proceso de adición de de celdas en los casos de incidencia izquierda-derecha **(a)** y derecha-izquierda **(b)**.

zan la aparición de graves errores numéricos en los sucesivos procesos de multiplicación matricial. Afortunadamente, podemos soslayar tales problemas recurriendo a una implementación astuta del procedimiento como la que se muestra en la Fig. 3.5. Según acabamos de demostrar, existe una relación directa entre la matriz de transferencia de una cierta celda y sus coeficientes de transporte. Pues bien, conocidos éstos para las celdas **(1)** y **(2)**, es posible encontrar una expresión para los coeficientes totales de la celda **(1)+(2)** en función de  $\tilde{t}_1^{\pm\pm}, \tilde{t}_2^{\pm\pm}$  sumando todos los posibles procesos de scattering múltiple:

$$\tilde{t}^{++} = \tilde{t}_2^{++} [\mathbb{1} - \tilde{t}_1^{+-} \tilde{t}_2^{-+}]^{-1} \tilde{t}_2^{++} \quad (3.48)$$

$$\tilde{t}^{+-} = \tilde{t}_2^{+-} + \tilde{t}_2^{++} \tilde{t}_1^{+-} [\mathbb{1} - \tilde{t}_2^{-+} \tilde{t}_1^{+-}]^{-1} \tilde{t}_2^{-+} \quad (3.49)$$

$$\tilde{t}^{--} = \tilde{t}_1^{--} [\mathbb{1} - \tilde{t}_2^{-+} \tilde{t}_1^{+-}]^{-1} \tilde{t}_2^{-+} \quad (3.50)$$

$$\tilde{t}^{-+} = \tilde{t}_1^{-+} + \tilde{t}_1^{--} \tilde{t}_2^{-+} [\mathbb{1} - \tilde{t}_1^{+-} \tilde{t}_2^{-+}]^{-1} \tilde{t}_1^{+-} \quad (3.51)$$

Repitiendo el proceso tantas veces como sea necesario, podemos encontrar las matrices de reflexión y transmisión o la matriz de transferencia total  $\tilde{T}_{PW}(z)$  para una celda tan grande como deseemos, sin preocuparnos ya de los errores numéricos gracias al carácter acotado de los elementos en  $\tilde{t}^{\pm\pm}$ . No obstante, eso redundará en un incremento considerable del tiempo de computación, ya que la adición de celdas escala como  $N_P^3$ , algo

mucho menos ventajoso que el ritmo  $N_P^2$  de la multiplicación matricial.<sup>17</sup> Y aunque la combinación óptima de ambos procedimientos<sup>18</sup> dependa fuertemente de las características particulares de cada problema, el cálculo de espectros mediante la matriz de transferencia nos saldrá, en general, bastante “caro”.

### 3.2.3. Validez de la aproximación

Tal y como se anunciaba al comienzo de la sección, no queremos darla por terminada sin haber entrado a discutir la validez de la aproximación en la que se basa el formalismo de la matriz de transferencia, más allá de los aspectos de mero cálculo numérico. A la vista de la expresión (3.29), tal validez debería limitarse al rango en el que se cumple la condición  $k_j a_j \ll 1$ . Así pues, una buena forma de comprobar hasta qué punto podemos fiarnos del esquema TMM consistiría en comparar la **relación de dispersión** real para el espacio libre con la que se deduce de la hipótesis de discretización. Si suponemos que  $k_x = k_y = 0$  sus expresiones son, respectivamente

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = k_z^2 \quad (3.52)$$

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = \frac{4}{a_z^2} \sin^2 \frac{k_z a_z}{2} \quad (3.53)$$

Resulta evidente que ambas expresiones coinciden para valores muy pequeños de  $k_z a_z$  y se van separando a la misma velocidad a la que lo hacen  $x$  y  $2 \sin \frac{x}{2}$ , según puede apreciarse en la Fig. 3.6a. Para curarnos en salud, estableceremos el límite de tolerancia en un 1 %, lo cual fija la cota de  $k_z a_z$  en número bastante “redondo”:

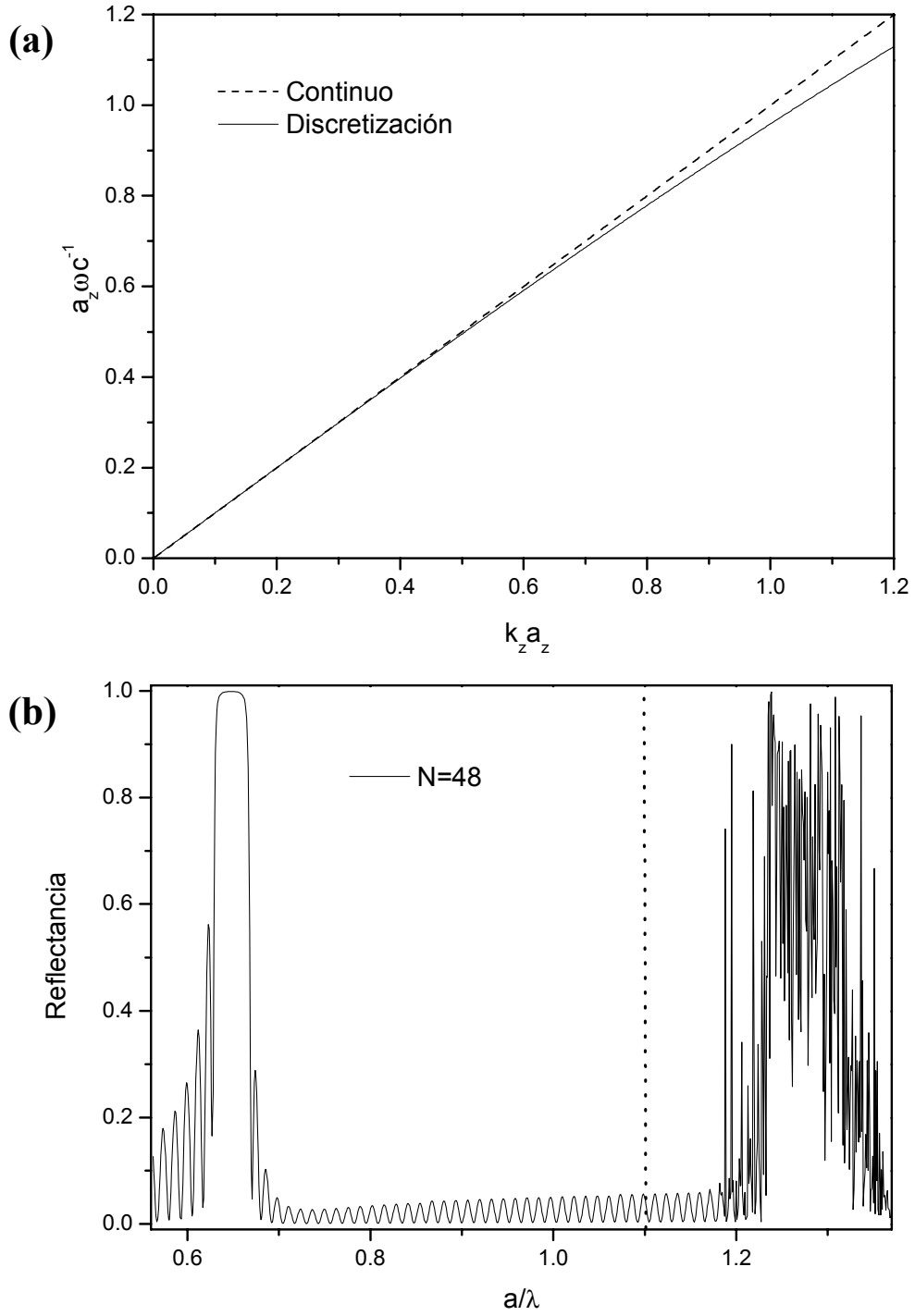
$$k_z a_z \lesssim 0.5 \quad (3.54)$$

Con el objeto de tener las ideas más claras, consideremos ahora un caso concreto: el cálculo del espectro de reflectancia en incidencia normal de una estructura fcc con su superficie orientada en la dirección (111). Para una geometría semejante, el módulo del vector primitivo del cristal a lo largo de la dirección de discontinuidad equivale a  $\sqrt{3}$  veces el parámetro de red  $a$  de la celda cúbica convencional

$$\mathbf{a}_3 = \gamma a_z \hat{\mathbf{e}}_z = a\sqrt{3} \hat{\mathbf{e}}_z \quad (3.55)$$

<sup>17</sup>Siendo  $N_P$  el número total de puntos empleado en la discretización.

<sup>18</sup>Es interesante señalar que el origen histórico de esta implementación “mixta” se remonta a los desarrollos teóricos del LEED en el último cuarto del siglo XX. Para más detalles, consúltase [Pendry74]



**Figura 3.6 :** (a) Comparación entre las relaciones de dispersión para el espacio libre proporcionadas por las ecuaciones (3.52) (trazos) y (3.53) (línea continua). Ambas son prácticamente coincidentes hasta valores de  $k_z a_z$  en torno a 0.5. (b) Espectro de reflectancia en incidencia normal sobre la superficie  $\{111\}$  para una estructura fcc compacta de esferas de  $\text{SiO}_2$  en aire, calculado mediante TMM suponiendo  $N = 48$ . Los valores de la energía se expresan en unidades reducidas adimensionales. Los parámetros escogidos para la discretización de la celda unidad han sido  $\alpha = 10$ ,  $\beta = 17$  y  $\gamma = 24$ . Puede apreciarse que la calidad del espectro se deteriora drásticamente por encima de 1.2, en razonable acuerdo con la predicción de (3.57) que marca la línea vertical discontinua.

lo que nos permite establecer la relación entre los parámetros de red cristalina y de discretización como

$$a_z = \frac{a\sqrt{3}}{\gamma} \quad (3.56)$$

Si asumimos que el sistema no presenta disipación, podemos reescribir la condición de convergencia en unidades reducidas adimensionales:

$$\frac{a}{\lambda} \lesssim \frac{\gamma}{4\pi\sqrt{3}} \quad (3.57)$$

En la Fig. 3.6b se representa el espectro de reflectancia total para un sistema como el mencionado, concretamente el compuesto por un conjunto de esferas de SiO<sub>2</sub> en aire bajo la condición de máximo empaquetamiento. El valor escogido para  $\gamma$  es el mayor posible dentro de nuestros recursos computacionales y representa una cota superior en torno a 1.1 para los valores de la energía en (3.57). Según puede apreciarse en la figura, la calidad del espectro empeora drásticamente por encima de  $1.2 \frac{a}{\lambda}$ , en bastante buen acuerdo con nuestra previsión. Ese es, en definitiva, el límite con el que nos tendremos que conformar, salvo hipotéticas “mejoras” inducidas por la presencia de disipación.<sup>19</sup>

En cualquier caso, y pese todos los inconvenientes expuestos,<sup>20</sup> el método de la matriz de transferencia resulta de gran utilidad para el cálculo de las propiedades ópticas en sistemas finitos, tal y como quedará patente en el Capítulo 5.

### 3.3. Discretización del dominio temporal (FDTD)

Si en la sección anterior procedíamos a sustituir las derivadas espaciales por un esquema de diferencias finitas, ahora se trata de hacer lo mismo con las derivadas temporales:<sup>21</sup>

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta \mathbf{E}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t + \Delta t) - \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\Delta t}; \quad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta \mathbf{H}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{H}(\mathbf{r}, t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.58)$$

De acuerdo con la prescripción de (3.58), reemplazaremos los miembros en la parte derecha de (3.17)-(3.22) por sus correspondientes aproximaciones una vez impuestas las habituales relaciones constitutivas. Obtendremos así, finalmente, un conjunto de ecuaciones doblemente discretizadas que nos proporcionarán una expresión explícita para los campos tras haber “avanzado” el tiempo la cantidad  $\Delta t$ , poniendo a nuestro alcance el

<sup>19</sup>Pagando el precio de amortiguar por igual los picos espurios y las características relevantes del espectro, claro está.

<sup>20</sup>Como que el espectro de la Fig. 3.6 requiriera más de 70 horas de CPU ...

<sup>21</sup>De ahí las siglas inglesas, tomadas de las iniciales de *Finite-Difference Time-Domain*

estudio de la evolución temporal de  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  a partir de sus valores iniciales:

$$\frac{1}{a_y} [E_z(\mathbf{r} + a_y \hat{\mathbf{e}}_y, t) - E_z(\mathbf{r}, t)] - \frac{1}{a_z} [E_y(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z, t) - E_y(\mathbf{r}, t)] = -\mu_0 \frac{H_x(\mathbf{r}, t) - H_x(\mathbf{r}, t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.59)$$

$$\frac{1}{a_z} [E_x(\mathbf{r} + a_z \hat{\mathbf{e}}_z, t) - E_x(\mathbf{r}, t)] - \frac{1}{a_x} [E_z(\mathbf{r} + a_x \hat{\mathbf{e}}_x, t) - E_z(\mathbf{r}, t)] = -\mu_0 \frac{H_y(\mathbf{r}, t) - H_y(\mathbf{r}, t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.60)$$

$$\frac{1}{a_x} [E_y(\mathbf{r} + a_x \hat{\mathbf{e}}_x, t) - E_y(\mathbf{r}, t)] - \frac{1}{a_y} [E_x(\mathbf{r} + a_y \hat{\mathbf{e}}_y, t) - E_x(\mathbf{r}, t)] = -\mu_0 \frac{H_z(\mathbf{r}, t) - H_z(\mathbf{r}, t - \Delta t)}{\Delta t} \quad (3.61)$$

$$\frac{1}{a_y} [H_z(\mathbf{r}, t) - H_z(\mathbf{r} - a_y \hat{\mathbf{e}}_y, t)] - \frac{1}{a_z} [H_y(\mathbf{r}, t) - H_y(\mathbf{r} - a_z \hat{\mathbf{e}}_z, t)] = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{E_x(\mathbf{r}, t + \Delta t) - E_x(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} \quad (3.62)$$

$$\frac{1}{a_z} [H_x(\mathbf{r}, t) - H_x(\mathbf{r} - a_z \hat{\mathbf{e}}_z, t)] - \frac{1}{a_x} [H_z(\mathbf{r}, t) - H_z(\mathbf{r} - a_x \hat{\mathbf{e}}_x, t)] = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{E_y(\mathbf{r}, t + \Delta t) - E_y(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} \quad (3.63)$$

$$\frac{1}{a_x} [H_y(\mathbf{r}, t) - H_y(\mathbf{r} - a_x \hat{\mathbf{e}}_x, t)] - \frac{1}{a_y} [H_x(\mathbf{r}, t) - H_x(\mathbf{r} - a_y \hat{\mathbf{e}}_y, t)] = \varepsilon_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{E_z(\mathbf{r}, t + \Delta t) - E_z(\mathbf{r}, t)}{\Delta t} \quad (3.64)$$

Este enfoque dinámico para la resolución de las ecuaciones de Maxwell, descrito por vez primera en varios trabajos<sup>22</sup> aparecidos en el último tercio del pasado siglo, ha terminado por convertirse en una de las técnicas más populares para abordar problemas electromagnéticos en los más diversos campos.<sup>23</sup> Por esa razón nos ha parecido oportuno incluir una breve descripción de los aspectos más destacados de su funcionamiento, ya que, quizá por razones de tipo “cultural”, su aplicación a los cristales fotónicos haya sido mucho más tardía,<sup>24</sup> pese a los esfuerzos de algunos autores<sup>25</sup> por proporcionar una implementación de validez completamente general.

---

<sup>22</sup>Cfr. [Yee66] y [Tafløve75]

<sup>23</sup>Para hacerse una idea de hasta qué punto es cierta tal afirmación, véase la referencia [Tafløve95].

<sup>24</sup>Tal y como se consignaba en la cronología de la Tabla 2.1, la primera mención aparece en [Chan95].

<sup>25</sup>Nos referimos, claro está, a la serie [Ward96], [Ward98] y [Ward00].



### 3.3.1. Cálculo de bandas y espectros

La obtención de la estructura de bandas de un sistema periódico tridimensional mediante el método FDTD comienza por imponer a los campos el cumplimiento del Teorema de Bloch para un determinado vector de onda  $\mathbf{k}$  de nuestro interés. A continuación, fijaremos las condiciones iniciales de  $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}$  y  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}$  como

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t = 0) = \mathbf{0}; \quad \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t = 0) = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{v} \times (\mathbf{k} + \mathbf{g}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3.65)$$

donde la suma en  $\mathbf{g}$  ha de entenderse restringida a un número finito de vectores de la red recíproca del cristal y el vector  $\mathbf{v}$  no ha de cumplir otra condición que la de que sus componentes tengan aproximadamente la misma magnitud. Esta elección tan particular<sup>26</sup> de los campos en  $t = 0$  nos garantiza *a priori* la transversalidad de las soluciones<sup>27</sup> al mismo tiempo que la existencia de un cierto **solape** entre el campo inicial y los autoestados con la etiqueta  $\mathbf{k}$ . Así pues, ya no resta más que dejar evolucionar las ecuaciones (3.59)-(3.64) hasta el tiempo  $T = N_T \Delta t$  que nos parezca oportuno.

Llegados a este punto, resulta conveniente introducir la transformada de Fourier de la **función de auto-correlación temporal** del campo como una nueva magnitud característica del problema a la que denominaremos **intensidad espectral**. De acuerdo con esa definición,

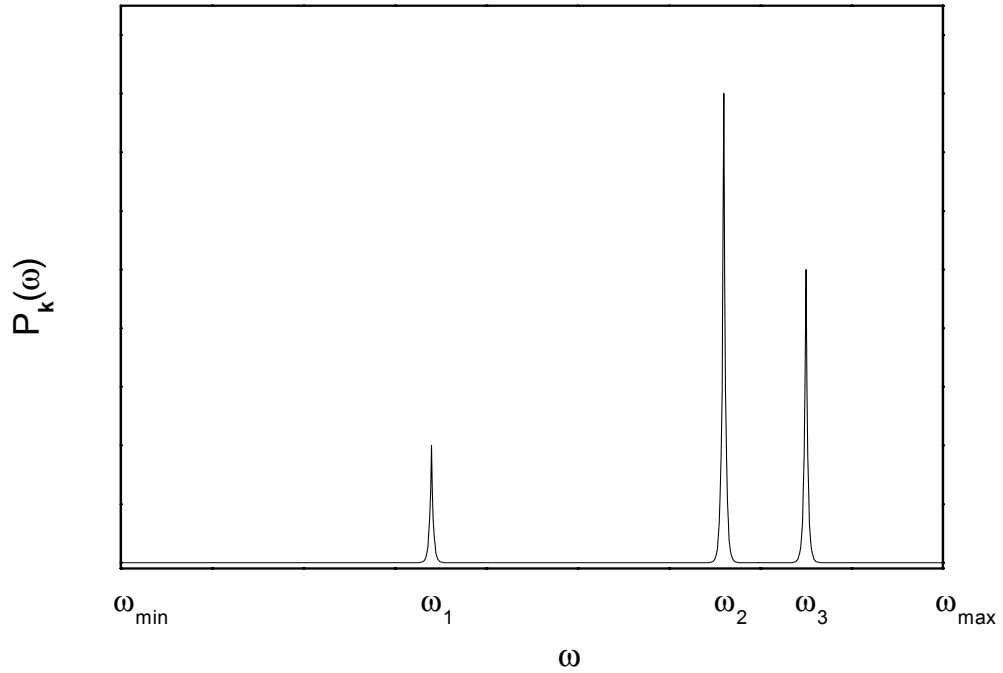
$$P_{\mathbf{k}}(\omega) \equiv \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{V_U} \int_U d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, t) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0) \quad (3.66)$$

donde  $U$  es la celda unidad del cristal y  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \equiv [\mathbf{F}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)]_{\alpha}$  para  $\mathbf{F} = \mathbf{E}$  ó  $\mathbf{H}$  y  $\alpha = x$  ó  $y$  ó  $z$ . La utilidad práctica de  $P_{\mathbf{k}}(\omega)$  no es otra que la de proporcionarnos una idea del “peso” relativo de cada una de las frecuencias comprendidas en el intervalo  $[\omega_{min} \sim \frac{2\pi}{T}, \omega_{max} \sim \frac{2\pi}{\Delta t}]$ . Pero debido a las condiciones de periodicidad del problema, esa distribución debe corresponderse con una serie de funciones delta como la que se muestra en la Fig. 3.7, centradas precisamente en los autovalores del campo electromagnético.<sup>28</sup> En consecuencia, bastará con repetir el proceso para distintos  $\mathbf{k}$ 's a lo largo de las direcciones de alta simetría hasta completar toda la estructura de bandas, de acuerdo a una filosofía  $\mathbf{k} \rightarrow \omega$  completamente análoga a la de la PWE. Si a esto se añade la eliminación de los tan molestos replegamientos, gracias a la posibilidad de emplear bases

<sup>26</sup>Para más detalles, véanse [Chan95] y [Ward96].

<sup>27</sup>Que, como es lógico, no se ve modificada por la evolución temporal del sistema.

<sup>28</sup>Lógicamente, la resolución dependerá del tiempo total de evolución.

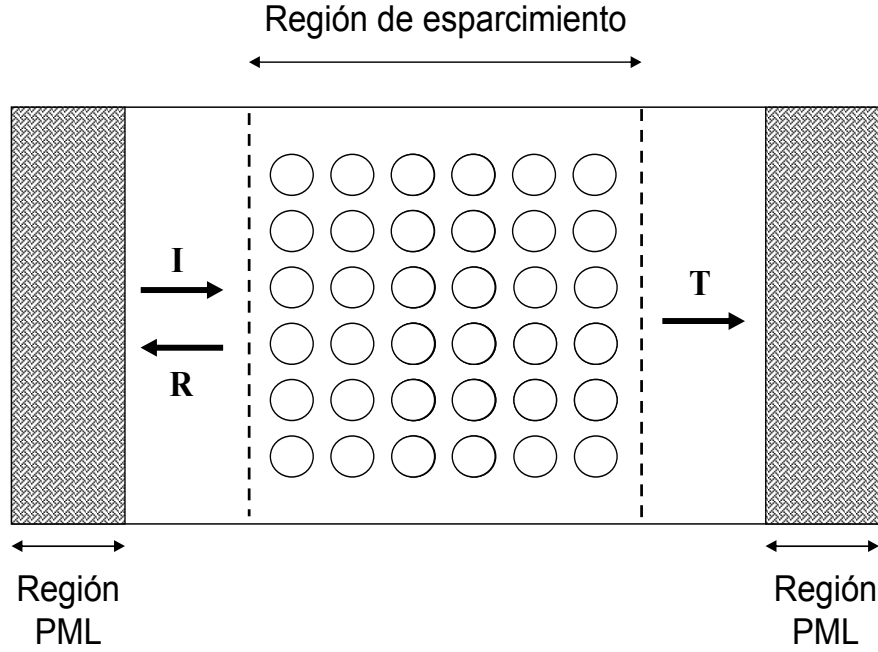


**Figura 3.7 :** Representación esquemática de la intensidad espectral del campo electromagnético en el interior de un cristal fotónico para un cierto vector de onda  $\mathbf{k}$ , en la que se muestra cómo las frecuencias correspondientes a los  $\mathbf{k}$ -autoestados del sistema pueden extraerse de los “picos” de  $P_{\mathbf{k}}(\omega)$  sin necesidad de preocuparnos por su intensidad relativa.

no ortogonales<sup>29</sup> tanto en la discretización como en la descripción del cristal, llegamos a la conclusión de que los métodos FDTD constituyen una alternativa digna de tenerse en cuenta a la hora de calcular bandas fotónicas.

En lo que al cálculo de espectros de reflectancia y transmitancia se refiere, la discretización del tiempo no supone una gran diferencia conceptual respecto a las técnicas TMM, ya que basta con aplicar la misma “receta” de la sección anterior (proyección en una base de ondas planas y sustitución en las ecuaciones (2.43) y (2.44)) después de

<sup>29</sup>Mencionadas por vez primera en [Roberts96]. Para una descripción exhaustiva de su implementación, recomendamos la lectura de [Ward96].



**Figura 3.8 :** Representación esquemática de la configuración típica para el cálculo de espectros de reflectancia/transmitancia mediante técnicas FDTD, basada en la Fig. 1 de [Ward00]. En cada paso de tiempo, se almacenan los valores de los campos sobre los planos que señalan las líneas discontinuas para calcular posteriormente la respuesta óptica del sistema en función de la frecuencia. Con el objeto de eliminar las reflexiones espurias en los extremos de la celda computacional, se han dispuesto PML's a ambos lados de la región de esparcimiento.

calcular la correspondientes transformadas de Fourier de los campos:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (3.67)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \quad (3.68)$$

Aparte de su indudable parentesco con la matriz de transferencia, la característica más peculiar del método FDTD a la hora de simular la respuesta de un sistema como el que se representa en la Fig. 3.8 es sin duda la importancia de las condiciones iniciales y de contorno. Pero vayamos por partes: parece razonable intuir que las condiciones iniciales de (3.65) no son las más apropiadas en este caso y deben reemplazarse por otras más realistas, como (por ejemplo) un haz gaussiano que contenga el rango de frecuencias de

nuestro interés, algo que *a priori* tampoco supone ningún problema.<sup>30</sup> ¿Cuál puede ser, entonces, el obstáculo para llevar a cabo la integración temporal? Pues, por sorprendente que parezca, algo tan “sencillo” como simular el espacio libre en los extremos del sistema.

Según ya hemos adelantado, el método de cálculo consiste en dejar evolucionar los campos e ir almacenando en cada paso de tiempo sus valores sobre los planos que señalan las líneas discontinuas de la Fig. 3.8 con el objeto de obtener *a posteriori* la respuesta en frecuencia. Una vez atravesados tales planos, los paquetes de ondas deberían continuar su viaje alejándose infinitamente del cristal sin volver a tener ninguna relación con él, pero, lógicamente, la celda computacional no puede hacerse infinita y eso provoca que, más pronto que tarde, las reflexiones múltiples en sus extremos “contaminen” irremediablemente la respuesta óptica del sistema, convirtiéndolo en una suerte de **cavidad resonante**. La solución a este grave problema consiste en situar en ambos extremos de la región de esparcimiento los denominados **Perfectly Matched Layers** (PML), capas de material absorbente astutamente diseñadas para eliminar de forma efectiva las ondas viajeras sin modificar las propiedades físicas del sistema. Cabe decir que, si bien el diseño de este tipo de estructuras ha sido objeto de un intenso estudio en los últimos años<sup>31</sup>, su aplicación práctica pasa, en última instancia, por el ajuste de unos parámetros empíricos (el coeficiente de absorción y el grosor del propio PML) a las características de cada problema concreto, labor que puede hacerse extraordinariamente tediosa.

### 3.3.2. Limitaciones, ventajas e inconvenientes

La mejor forma de iniciar el estudio de las limitaciones del esquema FDTD es, a nuestro juicio, proceder al análisis de la relación de dispersión aproximada que dicho método nos proporciona para el espacio libre:

$$\frac{4}{(\Delta t)^2} \sin^2 \frac{\omega \Delta t}{2} = 4c^2 \left( \frac{1}{a_x^2} \sin^2 \frac{k_x a_x}{2} + \frac{1}{a_y^2} \sin^2 \frac{k_y a_y}{2} + \frac{1}{a_z^2} \sin^2 \frac{k_z a_z}{2} \right) \quad (3.69)$$

A la vista de (3.69), no resulta difícil darse cuenta de que la exigencia de autovalores reales para el campo electromagnético impone una cota superior al intervalo de discretización temporal  $\Delta t$ :

$$(\Delta t)^2 < \left( \frac{c^2}{a_x^2} + \frac{c^2}{a_y^2} + \frac{c^2}{a_z^2} \right)^{-1} \quad (3.70)$$

Aun verificándose esta condición de mera consistencia, no podemos pasar por alto que el límite de validez proveniente de la aproximación a primeros vecinos en la discretización

<sup>30</sup>Cfr. [Ward00]

<sup>31</sup>Véanse [Berenger94], [Berenger96] y [Zhao96], por citar sólo los trabajos con mayor repercusión.

espacial es exactamente el mismo que en el caso TMM descrito en la sección anterior. En ese sentido, la única ventaja del esquema FDTD radicaría en la posibilidad de describir la celda unidad con mayor precisión empleando el mismo número de puntos gracias a un uso inteligente de bases no ortogonales.<sup>32</sup> Debemos descartar, pues, que la discretización en el dominio temporal nos permita acceder a un rango de energías significativamente más amplio que el de otros métodos.

Desde un punto de vista práctico, la mejor cualidad del FDTD es su ventajosa ley de escala para el tiempo de computación, directamente proporcional tanto al número total de puntos de discretización como al de pasos de tiempo:

$$t_{CPU} \sim N_P \cdot N_T \quad (3.71)$$

Ni que decir tiene que para aquellos sistemas en los que estas dos magnitudes sean completamente independientes, el FDTD puede considerarse un método “de orden N”, claramente superior, por lo tanto, a los descritos hasta ahora. Afortunadamente, la independencia entre  $N_P$  y  $N_T$  tan sólo exige<sup>33</sup> que la radiación no permanezca confinada dentro del material de forma indefinida, lo cual invalida la técnica para, por ejemplo, el estudio de fenómenos como la localización de luz, pero (gracias a los PMLs ...) no supone ningún obstáculo a la hora de abordar estructuras “periódicas”.

Para completar el cuadro de sus características, no podemos dejar de mencionar que la formulación FDTD tradicional de las ecuaciones de Maxwell no permitía introducir en la función dieléctrica una dependencia explícita con la frecuencia, lo cual restringía el estudio de sistemas metálicos al límite del **conductor perfecto**<sup>34</sup> Sin embargo, recientes trabajos de K. Sakoda y sus colaboradores<sup>35</sup> han hecho posible extender la discretización del dominio temporal también a los sistemas metálicos, si bien (de momento) sólo en dos dimensiones.

Y a modo de conclusión del presente apartado, un diagnóstico quizá excesivamente influenciado por mi propia experiencia como usuario ocasional del método:

Aunque *a priori* hubiera cabido esperar que el esquema FDTD alcanzase una popularidad semejante a la que disfruta en muchas otras áreas de la ingeniería a la hora de estudiar las propiedades fotónicas de sistemas 3D sin dependencia explícita de la frecuencia, esa predicción no se ha cumplido en absoluto. A mi juicio, y dejando a un lado los ya

---

<sup>32</sup> Así, por ejemplo, en el caso de incidencia normal sobre la cara {111} de una estructura fcc discutido con anterioridad, podría aumentarse el límite de convergencia de (3.57) en un factor  $\sqrt{3}$ .

<sup>33</sup> Cfr. [Pendry96]

<sup>34</sup> Sirva la referencia [Fan96] como ejemplo de tal limitación en los primeros trabajos en el campo.

<sup>35</sup> Véanse [Sakoda01] y [Ito01]

mencionados “problemas culturales”, eso se ha debido, sobre todo, a dos factores de índole eminentemente práctica:

- En primer lugar, la pequeña ventaja ( $N_P$  vs  $N_P \ln N_P$ ) de la que disfruta la discretización temporal frente a las ondas planas se ve amortiguada por la disponibilidad de implementaciones extraordinariamente optimizadas de la PWE que la hacen preferible para el cálculo de bandas.
- Y en lo tocante a los espectros, el esfuerzo necesario para definir las características óptimas de los PMLs colocan por delante, a la postre, a la formulación TMM tradicional, cuando no a otras que sacan partido directamente de las propiedades geométricas de los centros de esparcimiento, como la que se describirán a continuación.

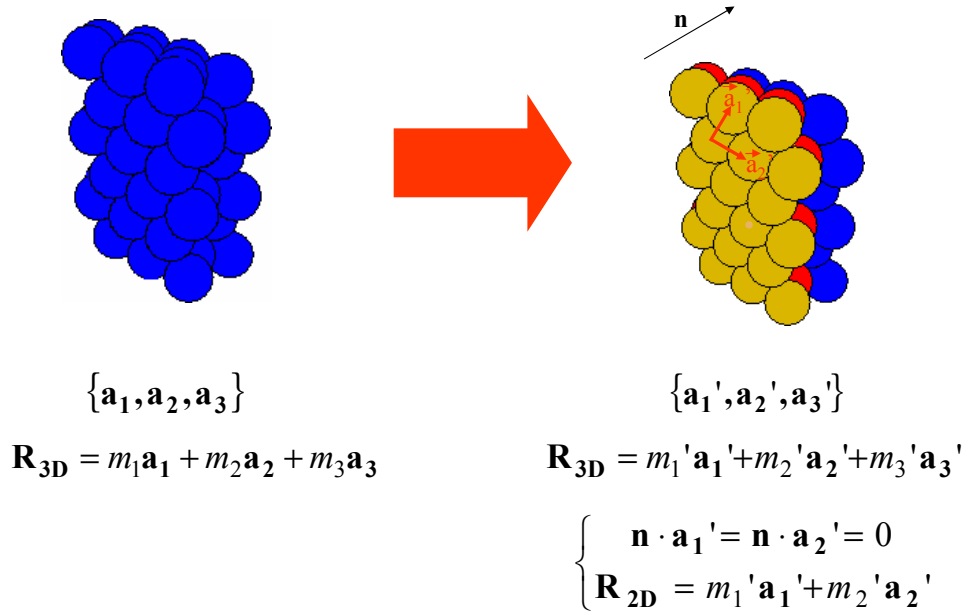
### 3.4. Expansión en multipolos esféricos (layer-KKR)

Antes de comenzar con la exposición de las características del método sobre el que versa la presente sección, nos resultará particularmente útil recordar el formalismo introducido en el Capítulo 2 a la hora de abordar el análisis de los cristales fotónicos finitos. Según establecimos en aquel momento, es posible reinterpretar cualquier estructura periódica tridimensional como una sucesión de infinitos planos normales a una cierta dirección  $\mathbf{n}$ , todo ello de forma que cada uno de esos planos constituya a su vez una estructura periódica en dos dimensiones, tal y como se resume gráficamente en la Fig. 3.9. Y dentro de esa nueva descripción, las propiedades ópticas del sistema vendrán determinadas por las expresiones formales para los campos incidente, reflejado y transmitido que se presentaban en aquel mismo capítulo.

Imaginemos ahora que, como ya nos sugiere la propia figura, los elementos constitutivos de esos planos “cristalinos” sean precisamente esferas. Esa circunstancia nos permite desarrollar explícitamente las expresiones (2.37), (2.39) y (2.41) en términos de un sumatorio en los **multipolos** de cada una de las esferas. Pese a que la forma explícita de los campos en esa nueva base es bastante poco manejable e incluye una buena cantidad de **funciones especiales**, razón por la cual hemos decidido no reproducirla aquí,<sup>36</sup> es posible comprobar que tales desarrollos convergen de forma extraordinariamente rápida y pueden, por lo tanto, truncarse a un orden relativamente bajo.<sup>37</sup>

<sup>36</sup>Remitimos al lector curioso a la referencia [Stefanou98].

<sup>37</sup>Con las limitaciones que se discutirán al final de la sección.



**Figura 3.9 :** Representación esquemática de una estructura tridimensional como sucesión de planos normales a una dirección dada, punto de partida del método layer-KKR.

Como el lector ya habrá podido sospechar, la denominación “layer-KKR” (o simplemente KKR) que usualmente recibe este método es un reconocimiento a J. Korringa, W. Kohn y N. Rostoker, pioneros en el aprovechamiento de la simetría esférica del potencial efectivo para la resolución numérica de la **ecuación de Schrödinger** en sistemas periódicos.<sup>38</sup> Por otra parte, sus semejanzas con el método de la matriz de transferencia son también notables, algo que no debe extrañarnos si pensamos que en ambos casos se trata de obtener el campo esparcido por un plano de elementos de scattering dispuestos de forma periódica y utilizarlo como entrada para el plano posterior.<sup>39</sup>

Cabe destacar que, si bien la primera formulación de las técnicas KKR para la resolución de las ecuaciones de Maxwell vectoriales aparece ya en los trabajos de K. Ohtaka mencionados en el Capítulo 2, nosotros hemos preferido utilizar la versión ligeramente posterior de A. Modinos y colaboradores,<sup>40</sup> por parecernos más didáctica en su planteamiento y (sobre todo) por ser la base de una implementación numérica razonablemente optimizada que ha sido puesta a la disposición de la comunidad científica.<sup>41</sup>

<sup>38</sup>Cfr. [Korringa47] y [Kohn54]

<sup>39</sup>Lo cual, dicho sea de paso, también evidencia su común inspiración en los procesos de LEED.

<sup>40</sup>Cfr. [Modinos87], [Stefanou91] y [Stefanou92]

<sup>41</sup>Véanse [Stefanou98] y [Stefanou00] para más detalles.

### 3.4.1. Cálculo de bandas y espectros

En claro paralelismo con lo expuesto en la sección 3.2.2, es posible expresar el valor del campo eléctrico en la zona del espacio<sup>42</sup> comprendida entre los planos  $N$  y  $(N + 1)$  como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \{ \mathbf{E}_{\mathbf{g}}^+(N) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{A}_N)} + \mathbf{E}_{\mathbf{g}}^-(N) e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^- \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{A}_N)} \} \quad (3.72)$$

donde  $\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^{\pm}$  debe entenderse una vez más según la definición de (2.36) y  $\mathbf{A}_N$  representa el origen de coordenadas más apropiado entre ambos planos. Y puesto que los coeficientes de desarrollo del campo en planos sucesivos se hallan a su vez conectados por medio de las correspondientes **matrices de scattering**<sup>43</sup>  $\tilde{Q}$ ,

$$E_{\mathbf{g}i}^-(N) = \sum_{\mathbf{g}'i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g}i;\mathbf{g}'i'}^{IV} E_{\mathbf{g}'i'}^-(N+1) + \sum_{\mathbf{g}'i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g}i;\mathbf{g}'i'}^{III} E_{\mathbf{g}'i'}^+(N) \quad (3.73)$$

$$E_{\mathbf{g}i}^+(N+1) = \sum_{\mathbf{g}'i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g}i;\mathbf{g}'i'}^I E_{\mathbf{g}'i'}^+(N) + \sum_{\mathbf{g}'i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g}i;\mathbf{g}'i'}^{II} E_{\mathbf{g}'i'}^-(N+1) \quad (3.74)$$

basta con aplicar el Teorema de Bloch y una cierta manipulación formal para terminar obteniendo un problema de autovalores algebraico cuya diagonalización nos proporcionará la estructura de bandas fotónica del sistema, si bien de nuevo en el algo molesto formato  $k_z = k_z(\omega; \mathbf{k}_{\parallel})$ :

$$\begin{pmatrix} \tilde{Q}^I & \tilde{Q}^{II} \\ -[\tilde{Q}^{IV}]^{-1} \tilde{Q}^{III} \tilde{Q}^I & [\tilde{Q}^{IV}]^{-1} [\mathbf{1} - \tilde{Q}^{III} \tilde{Q}^{II}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N+1) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^+(N) \\ \mathbf{E}^-(N+1) \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

Por otra parte, las ecuaciones (3.73) y (3.74) también nos permiten, suponiendo una incidencia de izquierda a derecha, identificar rápidamente los coeficientes de los campos reflejado y transmitido, el único ingrediente que necesitamos para completar la descripción de la respuesta óptica del sistema, una vez efectuadas las sustituciones oportunas en (2.43) y (2.44):

$$[\mathbf{E}_{trans}]_{\mathbf{g},i}^+ = \sum_{i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g},i;\mathbf{g}',i'}^I [\mathbf{E}_{inc}]_{\mathbf{g}',i'}^+ \quad (3.76)$$

$$[\mathbf{E}_{ref}]_{\mathbf{g},i}^- = \sum_{i'} \tilde{Q}_{\mathbf{g},i;\mathbf{g}',i'}^{III} [\mathbf{E}_{inc}]_{\mathbf{g}',i'}^+ \quad (3.77)$$

Como último detalle sobre el cálculo de espectros, no podemos dejar de resaltar la plena vigencia de las fórmulas de adición de celdas (3.48)-(3.51) introducidas en la sección

<sup>42</sup>Posiblemente, de grosor infinitesimal.

<sup>43</sup>Cuya definición exacta puede hallarse en [Stefanou98]



precedente, que podemos emplear de forma directa<sup>44</sup> para obtener las propiedades de un sistema compuesto por varios planos de esferas con distintos tamaños, materiales etc.

### 3.4.2. Validez de la aproximación

Tal y como ya habrá adivinado el lector, la principal restricción a la validez de los desarrollos layer-KKR reside sobre todo en su hipótesis inicial, pues nada nos garantiza la convergencia de los resultados si los centros de scattering no son estrictamente esféricos. Por otra parte, el mismo planteamiento de la ecuación (3.72) implica la existencia de una capa homogénea (por mínima que sea) entre los sucesivos planos de esferas, lo cual supone una restricción adicional que descartaría (al menos en principio) las estructuras con empaquetamiento compacto. Pero incluso en el caso con geometría más favorable, no es fácil conocer *a priori* si, en el momento de ser truncada, una cierta expansión multipolar ha convergido lo suficiente como para reproducir adecuadamente las características reales del campo electromagnético en el sistema objeto de nuestro estudio.

Según se adelantaba en la introducción, el parámetro escogido para caracterizar tal truncamiento es el orden de los multipolos<sup>45</sup> con los que se va a expandir<sup>46</sup> el campo esparcido en cada sitio de red. En el llamado **límite de onda larga** (bajas frecuencias o esferas pequeñas), la convergencia de la serie es tan rápida que incluso puede servirnos una **aproximación dipolar**, pero al aumentar la energía del campo o el tamaño de las esferas se hace necesario introducir órdenes multipolares cada vez más elevados. Con carácter general, cuanto mayores sean éstos, mayores serán nuestras garantías respecto a los resultados... y mayor será también el esfuerzo computacional. Sin embargo, más allá de un cierto límite,<sup>47</sup> la inclusión de estos términos adicionales provoca a su vez inestabilidades numéricas<sup>48</sup> que causan la aparición de **absorciones ficticias** en el rango de más baja energía. Afortunadamente, podemos detectar el problema valiéndonos del coeficiente de absorción  $U$  introducido en el Capítulo 2 como un primer test de la consistencia del cálculo: si para una cierta frecuencia la función dieléctrica del sistema es estrictamente real, la absorción ha de ser nula y toda traza de su presencia en dicha energía debe atribuirse a errores numéricos. Más allá de esta primera y siempre útil

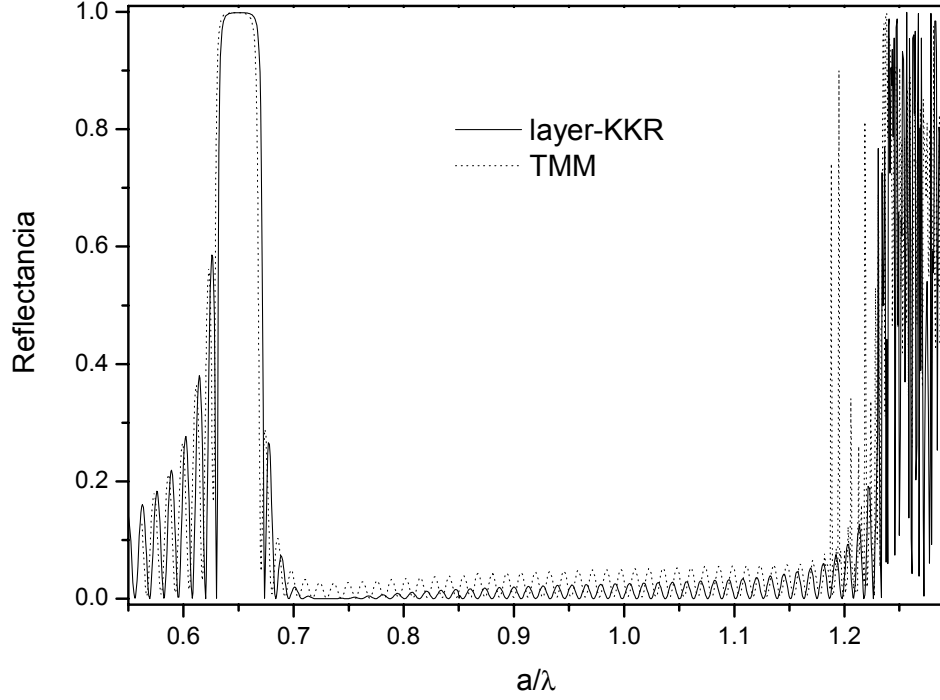
<sup>44</sup>Tras la correspondiente identificación  $\tilde{t}^{++} \rightarrow \tilde{Q}^I$   $\tilde{t}^{+-} \rightarrow \tilde{Q}^{II}$   $\tilde{t}^{-+} \rightarrow \tilde{Q}^{III}$   $\tilde{t}^{--} \rightarrow \tilde{Q}^{IV}$

<sup>45</sup>Es decir, el **momento angular máximo**  $l_{max}$  que se permite a los armónicos esféricos vectoriales

<sup>46</sup>Hasta un orden Bragg determinado, que suele expresarse en forma de una cota  $g_{max}$  para el módulo de los vectores de red recíproca. Como es lógico,  $l_{max}$  y  $g_{max}$  han de guardar una cierta proporción.

<sup>47</sup>Que, al menos con la implementación numérica disponible, puede fijarse heurísticamente en  $l_{max} > 7$

<sup>48</sup>Debido a la cancelación incompleta de términos divergentes en las series, según nos confirmó el propio N. Stefanou en comunicación privada.



**Figura 3.10 :** Comparación del espectro de reflectancia de la Fig. 3.6b (trazos) con el cálculo layer-KKR (línea continua) para el mismo sistema físico. Puede apreciarse que, salvo pequeños detalles, ambos resultados son prácticamente coincidentes en todo el intervalo de confianza del método TMM. Los valores escogidos para el truncamiento de la serie han sido  $l_{max} = 7$  y  $g_{max} = 19/|a_1|$ . La energía se expresa en unidades reducidas adimensionales.

comprobación, los estudios de convergencia<sup>49</sup> de las series se convierten en una tarea un tanto tediosa: cálculo con un cierto valor de los parámetros, modificación al alza de los mismos y comparación de los nuevos resultados con los antiguos en la esperanza de alcanzar el límite de variación establecido antes de llegar a la zona de inestabilidad.

Pero pasemos a analizar con detalle el caso de mayor interés para nuestra investigación: según es bien sabido, la condición de empaquetamiento compacto fcc implica un radio de esfera  $R_{cp} = a/2\sqrt{2}$ , siendo  $a$  el parámetro de red de la celda cúbica convencional. Puesto que la distancia entre planos adyacentes con orientación (111) es  $d_{111} = a/\sqrt{3} < 2R_{cp}$ , parecería que el estudio de los ópalos artificiales debería descartarse *a priori*. Sin embargo, según puede apreciarse en la Fig. 3.10, ese no es en absoluto el caso, ya que los resultados layer-KKR para este tipo de sistema coinciden de forma más que satisfactoria con los valores de referencia<sup>50</sup> y además aventajan a éstos en casi

<sup>49</sup>De los que [Stefanou91] constituye un buen ejemplo.

<sup>50</sup>Entendiendo como tales los proporcionados por el método TMM.

un factor 5 en lo que a tiempo de cálculo se refiere. A simple vista, nos encontramos ante una de esas raras ocasiones en las que un método de cálculo funciona mejor de lo esperado,<sup>51</sup> pero... ¿dónde está el límite?

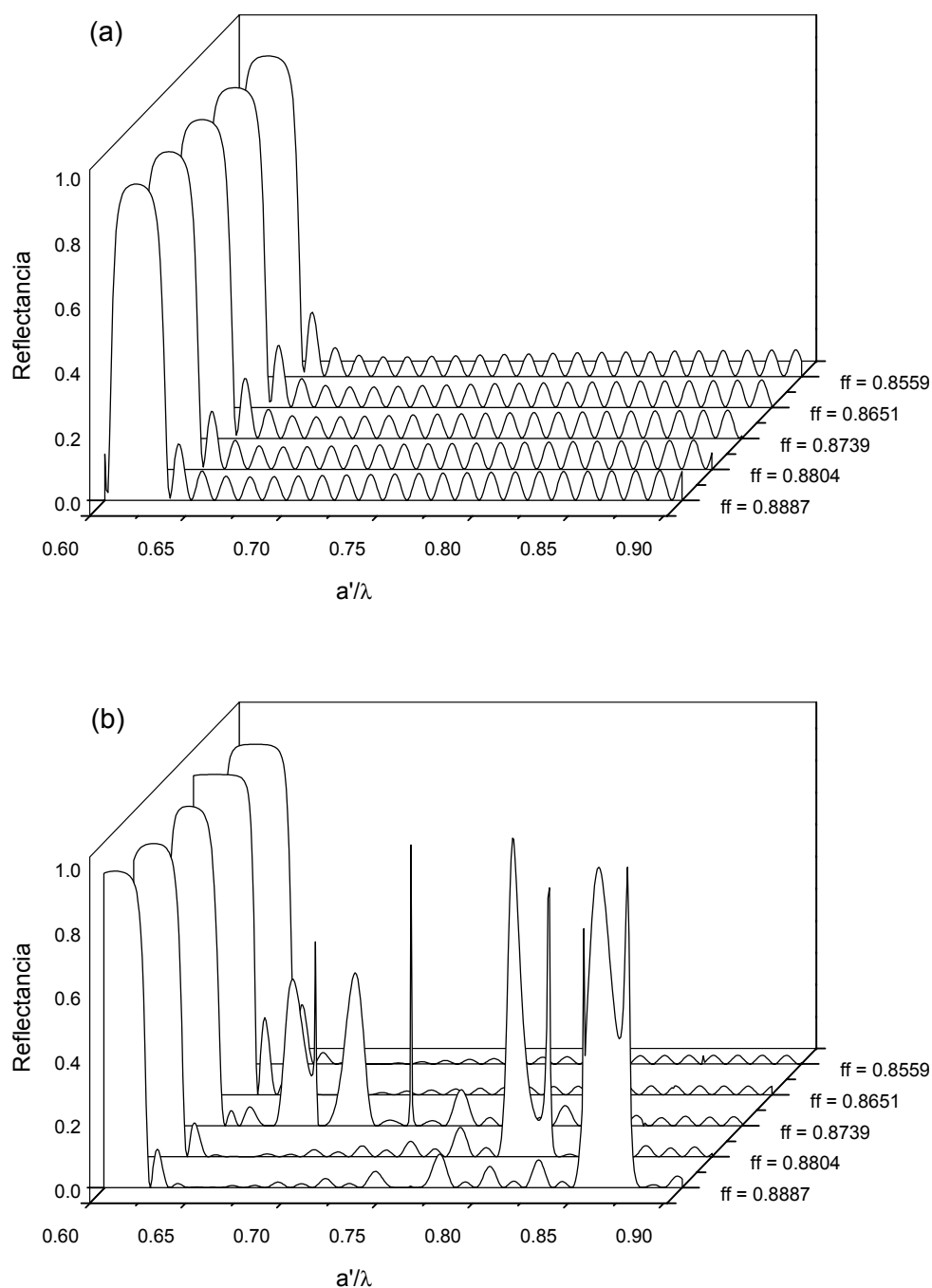
Imaginemos que se aumenta el radio de las esferas sin alterar la posición relativa de sus centros, según la receta más usual para modelizar el proceso de sinterización. Además de incrementar la fracción de llenado por encima del valor característico del empaquetamiento compacto, ese proceso alejaría al sistema de las condiciones de estabilidad por partida doble, al invadirse aún más el espacio entre planos y perder las esferas su propio carácter de tales como consecuencia de la interpenetración. El efecto resultante en las propiedades óptica del sistema queda recogido en la Fig. 3.11: en la parte superior se presenta la evolución de los espectros TMM, completamente insensibles a los “conflictos” entre esferas. Puede observarse cómo los máximos se desplazan “rígidamente” hacia la izquierda de la gráfica. Por contra, en el caso de los espectros layer-KKR de la parte inferior, ese mismo desplazamiento se ve acompañado por gran cantidad de picos espurios para fracciones de llenado por encima del 87 %. Aquí parece estar el límite hasta el que se puede “forzar” el método, límite sin duda más que suficiente para nuestros propósitos.

Así pues, concluiremos este apartado consignando que la comparación con los resultados de la matriz de transferencia nos permite afirmar que la expansión en multipolos esféricos constituye el método más eficiente para el estudio de la respuesta óptica de los ópalos artificiales de  $\text{SiO}_2$ , algo que no podía darse por sentado *a priori*. Y a efectos de mera completitud, sólo resta añadir que el esquema layer-KKR permite abordar tanto la presencia de disipación como la dependencia explícita con la frecuencia de la función dieléctrica sin que eso introduzca complicaciones adicionales en el cálculo.<sup>52</sup>

---

<sup>51</sup>Lo cual quizá no sea tan extraño si tenemos en cuenta que el contraste de índices entre el  $\text{SiO}_2$  y el aire es menor que 1.5.

<sup>52</sup>Cfr. [Modinos01]



**Figura 3.11 :** Estudio de la evolución del espectro de reflectancia en función de la fracción de llenado para el mismo sistema de la Fig. 3.10. Puede apreciarse que los espectros de la parte **(a)**, calculados mediante el método de la matriz de transferencia, se desplazan “rígidamente”, a diferencia de los resultados layer-KKR de la parte **(b)**, plagados de picos espurios para fracciones de llenado por encima del 87%. Adviértase que los valores de la energía se expresan en términos de  $a' = \eta a < a$  como reflejo de la progresiva contracción del parámetro de red provocada por la sinterización.

### 3.5. Otros métodos

Aunque hasta ahora nos hayamos centrado exclusivamente en las técnicas numéricas empleadas en el transcurso de nuestra propia investigación, no podemos dar por terminado este capítulo sin siquiera mencionar la existencia de métodos tales como los **desarrollos MMP**<sup>53</sup> o los enfoques basados en **elementos finitos**,<sup>54</sup> perfectamente válidos para el estudio de estructuras periódicas tridimensionales a pesar de no haber gozado hasta la fecha de una gran repercusión dentro de la comunidad de cristales fotónicos. Así pues, su ausencia de este documento debe atribuirse exclusivamente a la falta de una ocasión propicia para su uso, sin que eso suponga en modo alguno un juicio negativo sobre sus posibilidades.

Y salvadas ya de este modo las objeciones del lector más purista, no queda más que resumir todo lo expuesto hasta aquí en el cuadro de la Fig. 3.12, con la esperanza de haber conseguido aclarar suficientemente cómo se han calculado las bandas y espectros que se presentarán a continuación.

Método	Filosofía	¿Admite cualquier geometría?	¿Admite $\varepsilon = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$ ?	Preferible para el cálculo de	Coste computacional
PWE	$\mathbf{k} \rightarrow \omega$	Sí	No	Bandas	Moderado
TMM	$\omega \rightarrow \mathbf{k}$	Sí	Sí	Espectros	Alto
FDTD	$\mathbf{k} \rightarrow \omega$	Sí	No	Bandas	De bajo a moderado
KKR	$\omega \rightarrow \mathbf{k}$	No	Sí	Espectros	Bajo

**Figura 3.12** : Resumen de las principales características de los métodos numéricos presentados a lo largo del capítulo. Nótese que las restricciones sobre la función dieléctrica han de entenderse como referidas exclusivamente a sistemas tridimensionales.

<sup>53</sup>Para una completa descripción, véase [Moreno02] y las referencias allí incluidas.

<sup>54</sup>Cfr. [Dobson00]

## Referencias

- [Arfken95] G. B. Arfken y H. J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, San Diego, 4 ed<sup>ón</sup>., 1995.
- [Bell95] P. M. Bell, J. B. Pendry, L. Martín-Moreno y A. J. Ward. *A program for calculating photonic band structures and transmission coefficients of complex structures*. Computer Physics Communications **85** (2), 306–322, febrero 1995.
- [Berenger94] J. P. Berenger. *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*. Journal of Computational Physics **114** (2), 185–200, octubre 1994.
- [Berenger96] J. P. Berenger. *Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*. Journal of Computational Physics **127** (2), 363–379, septiembre 1996.
- [Chan95] C. T. Chan, Q. L. Yu y K. M. Ho. *Order- $N$  spectral method for electromagnetic waves*. Physical Review B **51** (23), 16635–16642, junio 1995.
- [Dobson00] D. C. Dobson, J. Gopalakrishnan y J. E. Pasciak. *An efficient method for band structure calculations in 3D photonic crystals*. Journal of Computational Physics **161** (2), 668–679, julio 2000.
- [Fan96] S. Fan, P. R. Villeneuve y J. D. Joannopoulos. *Large omnidirectional band gaps in metallodielectric photonic crystals*. Physical Review B **54** (16), 11245–11251, octubre 1996.
- [Halevi00] P. Halevi y F. Ramos-Mendieta. *Tunable photonic crystals with semiconducting constituents*. Physical Review Letters **85** (9), 1875–1878, agosto 2000.
- [Ho90] K. M. Ho, C. T. Chan y C. M. Soukoulis. *Existence of a photonic band gap in periodic dielectric structures*. Physical Review Letters **65** (25), 3152–3155, diciembre 1990.
- [Ito01] T. Ito y K. Sakoda. *Photonic bands of metallic systems. II. Features of surface plasmon polaritons*. Physical Review B **64**, 045117/1–8, julio 2001.

- [Jackson75] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, New York, 2<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1975.
- [Johnson01] S. G. Johnson y J. D. Joannopoulos. *Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis*. Optics Express **8** (3), 173–190, enero 2001.
- [Kohn54] W. Kohn y N. Rostoker. *Solution of Schrödinger equation in periodic lattices with an application to metallic Lithium*. Physical Review **94** (5), 1111–1120, junio 1954.
- [Korringa47] J. Korringa. *On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal*. Physica **13** (6-7), 392–400, junio 1947.
- [Kuzmiak94] V. Kuzmiak, A. A. Maradudin y F. Pincemin. *Photonic band structures of two-dimensional systems containing metallic components*. Physical Review B **50** (23), 16835–16844, diciembre 1994.
- [Kuzmiak97] V. Kuzmiak y A. A. Maradudin. *Photonic band structures of one- and two-dimensional periodic systems with metallic components in the presence of dissipation*. Physical Review B **55** (12), 7427–7444, marzo 1997.
- [Leung90] K. M. Leung y Y. F. Liu. *Full vector wave calculation of photonic band structures in face-centered cubic dielectric media*. Physical Review Letters **65** (21), 2646–2649, noviembre 1990.
- [Meade93] R. D. Meade, A. M. Rappe, K. D. Brommer, J. D. Joannopoulos y O. L. Alerhand. *Accurate theoretical analysis of photonic band-gap materials*. Physical Review B **48** (11), 8434–8437, septiembre 1993.
- [Modinos87] A. Modinos. *Scattering of electromagnetic waves by a plane-of-spheres formalism*. Physica A **141** (2-3), 575–588, marzo 1987.
- [Modinos01] A. Modinos, N. Stefanou y V. Yannopapas. *Applications of the layer-KKR method to photonic crystals*. Optics Express **8** (3), 197–202, enero 2001.
- [Moreno02] E. Moreno. *MMP Modeling and Optimization of Photonic Crystals, Optical Devices and Nanostructures*. Tesis Doctoral, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Zürich, marzo 2002.

- [Pendry74] J. B. Pendry. *Low Energy Electron Diffraction: The Theory and its Application to Determination of Surface Structure*. Academic Press, London, 1<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1974.
- [Pendry92] J. B. Pendry y A. MacKinnon. *Calculation of photon dispersion relations*. Physical Review Letters **69** (19), 2772–2774, noviembre 1992.
- [Pendry94] J. B. Pendry. *Photonic band structures*. Journal of Modern Optics **41** (2), 209–229, febrero 1994.
- [Pendry96] J. B. Pendry. *Calculating photonic band structure*. Journal of Physics: Condensed Matter **8** (9), 1085–1108, febrero 1996.
- [Roberts96] P. J. Roberts, T. A. Birks, P. S. J. Russell, T. J. Sheperd y D. M. Atkin. *Two-dimensional photonic band-gap structures as quasi-metals*. Optics Letters **21** (7), 507–509, abril 1996.
- [Sakoda95] K. Sakoda. *Optical transmittance of a two-dimensional triangular photonic lattice*. Physical Review B **51** (7), 4672–4675, febrero 1995.
- [Sakoda01] K. Sakoda, N. Kawai, T. Ito, A. Chutinan, S. Noda, T. Mitsuyu y K. Hiro. *Photonic bands of metallic systems. I. Principle of calculation and accuracy*. Physical Review B **64**, 045116/1–8, julio 2001.
- [Sözüer92] H. S. Sözüer, J. W. Haus y R. Inguva. *Photonic bands: Convergence problems with the plane-wave method*. Physical Review B **45** (24), 13962–13972, junio 1992.
- [Stefanou91] N. Stefanou y A. Modinos. *Scattering of light from a two-dimensional array of spherical particles on a substrate*. Journal of Physics: Condensed Matter **3** (41), 8135–8148, octubre 1991.
- [Stefanou92] N. Stefanou, V. Karathanos y A. Modinos. *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*. Journal of Physics: Condensed Matter **4**, 7389–7400, septiembre 1992.
- [Stefanou98] N. Stefanou, V. Yannopapas y A. Modinos. *Heterostructures of photonic crystals: frequency bands and transmission coefficients*. Computer Physics Communications **113** (1), 49–77, septiembre 1998.



- [Stefanou00] N. Stefanou, V. Yannopapas y A. Modinos. *Multem 2: A new version of the program for transmission and band-structure calculations of photonic crystals*. Computer Physics Communications **132** (1-2), 189–196, octubre 2000.
- [Taflove75] A. Taflove y M. E. Brodwin. *Numerical solution of steady-state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques **23** (8), 623–630, agosto 1975.
- [Taflove95] A. Taflove. *Computational Electrodynamics. The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House Inc., Norwood, 1<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1995.
- [Ward96] A. J. Ward. *Transfer Matrices, Photonic Bands and Related Quantities*. Tesis Doctoral, University of London, London, julio 1996.
- [Ward98] A. J. Ward y J. B. Pendry. *A program for calculating photonic band structures and Green's functions using a non-orthogonal FDTD method*. Computer Physics Communications **112** (1), 23–41, julio 1998.
- [Ward00] A. J. Ward y J. B. Pendry. *A program for calculating photonic band structures, Green's functions and transmission/reflection coefficients using a non-orthogonal FDTD method*. Computer Physics Communications **128** (3), 590–621, junio 2000.
- [Yee66] K. Yee. *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation **14** (3), 302–307, mayo 1966.
- [Zhang90] Z. Zhang y S. Satpathy. *Electromagnetic wave propagation in periodic structures: Bloch wave solution of Maxwell's equations*. Physical Review Letters **65** (21), 2650–2653, noviembre 1990.
- [Zhao96] L. Zhao y A. C. Cangellaris. *GT – PML: generalized theory of perfectly matched layers and its application to the reflectionless truncation of finite-difference time-domain grids*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques **44** (12), 2555–2563, diciembre 1996.



# CAPÍTULO 4

## Caracterización de las simetrías del campo electromagnético

*¡Tigre! ¡Tigre! luz llameante  
En los bosques de la noche,  
¿Qué ojo o mano inmortal  
Pudo idear tu terrible simetría?*

William Blake *El Tigre*

Al aplicar a un sistema concreto las técnicas descritas en el capítulo previo, corremos el riesgo de perder la visión física del problema, limitándonos a usar los métodos de cálculo como una “caja negra” que escapa a nuestro control. Afortunadamente, contamos con una poderosa aliada a la que siempre podremos recurrir para evitar el desastre...

### Contenido

<b>4.1. Introducción</b>	<b>87</b>
<b>4.2. Operaciones de simetría en sistemas periódicos</b>	<b>87</b>
4.2.1. Algunas definiciones	87
4.2.2. Autofunciones y operadores de simetría	90
4.2.3. Teoría de Representaciones	91
4.2.4. En resumen...	92
<b>4.3. Caracterización de las propiedades de simetría</b>	<b>93</b>
4.3.1. Evaluación del carácter de las representaciones en $\mathcal{L}_k$	93
4.3.2. De la simetría de las autofunciones a la simetría de las bandas	94
<b>4.4. Aplicación al caso del campo electromagnético</b>	<b>97</b>
<b>Referencias</b>	<b>101</b>



## 4.1. Introducción

Si en el Capítulo 2 aprovechábamos la invariancia de  $\varepsilon(\mathbf{r})$  bajo traslaciones de un vector de red para etiquetar los autoestados del campo electromagnético, parece natural preguntarnos ahora si existe algún otro tipo de transformación que, manteniendo igualmente invariante la función dieléctrica, pueda proporcionarnos información adicional sobre las soluciones del problema, una vez obtenidas éstas a partir de los métodos descritos en el capítulo precedente. Como el lector ya puede sospechar, la respuesta es afirmativa. De hecho, todas las transformaciones con esa propiedad pueden englobarse en una categoría general, las **operaciones de simetría**, a cuya descripción está dedicada la primera parte del presente capítulo. Una vez establecidas algunas definiciones generales, se procederá a desarrollar el formalismo que permite la clasificación de las soluciones de un problema vectorial de autovalores genérico a partir de sus propiedades de transformación bajo un grupo de operaciones de simetría. Finalmente, en la última sección, aplicaremos dicho procedimiento a la magnitud física objeto de nuestro estudio, poniendo de manifiesto cómo la caracterización de las propiedades de simetría del campo electromagnético puede ayudarnos a comprender mejor las propiedades ópticas de los cristales fotónicos.

Y antes de concluir esta pequeña sección introductoria, me gustaría señalar que, si bien el presente capítulo no constituye una exposición completamente “auto-contenida” de los temas que en él se abordan, sí se ha hecho un esfuerzo por (al menos) mencionar en el texto los pasos intermedios que permiten conectar las definiciones generales con los resultados de aplicación práctica. Para detalles más técnicos, remitimos al lector interesado a los Apéndices A y B, así como a las referencias incluidas en la bibliografía.

## 4.2. Operaciones de simetría en sistemas periódicos

### 4.2.1. Algunas definiciones

De forma absolutamente general, podemos definir operación de simetría como un cambio en el sistema de referencia por medio del cual describimos el objeto de nuestro estudio. Si ese proceso no implica cambios en su descripción, diremos que nuestro problema es invariante bajo dicha operación. Es posible identificar, en principio, dos tipos de operaciones de simetría: las que no dejan invariante ningún punto del espacio y las que sí cuentan con puntos fijos, que en consecuencia se conocen como **operaciones**

**puntuales.**<sup>1</sup> Un buen ejemplo de las primeras son las traslaciones primitivas de las que nos hemos venido ocupando hasta ahora, mientras que por su parte, los **giros** y las **reflexiones** constituyen las operaciones puntuales por excelencia.

Nada nos impide entonces definir una categoría más general: se trata de la **operación espacial**, entendida como la **composición** (es decir, la aplicación sucesiva) de una traslación y una operación puntual. De esta forma, tanto las traslaciones como las operaciones puntuales podrían entenderse como casos particulares del tipo espacial, si las consideramos en composición con la operación identidad y el vector nulo, respectivamente. En consecuencia, resulta oportuno introducir aquí la notación de **operadores de Seitz**, que hace explícita dicha composición al expresar las operaciones de simetría en la forma  $\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}$ , donde  $\hat{A}$  representa una operación puntual cualquiera y  $\mathbf{t}$  el vector de la traslación correspondiente. Siguiendo el convenio de [Wherrett86] e [Inui90], la acción de este operador sobre un vector  $\mathbf{r}$  se define como

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}\mathbf{r} \equiv \tilde{A}\mathbf{r} + \mathbf{t} \quad (4.1)$$

siendo  $\tilde{A}$  la matriz asociada a la operación puntual. Cuando el objeto de la transformación es una función escalar  $\psi(\mathbf{r})$ , el operador actúa sólo sobre su argumento

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\tilde{A}^{-1}\mathbf{r} - \tilde{A}^{-1}\mathbf{t}) \quad (4.2)$$

mientras que en el caso más general de una función vectorial  $\Psi(\mathbf{r})$  lo hace tanto sobre el argumento como sobre la propia función:

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \tilde{A}\Psi(\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}^{-1}\mathbf{r}) = \tilde{A}\Psi(\tilde{A}^{-1}\mathbf{r} - \tilde{A}^{-1}\mathbf{t}) \quad (4.3)$$

Como último detalle técnico, debemos tener presente que cualquier traslación genérica  $\mathbf{t}$  puede escribirse en la forma  $\mathbf{t} = \mathbf{R} + \tau$ , es decir, como la suma de una traslación primitiva y un vector  $\tau$  que no tiene por qué serlo. Así, el caso en el que  $\mathbf{R} = \mathbf{0}$  y  $0 < |\tau| < |\mathbf{a}_i| \forall i$  viene a completar nuestra clasificación cualitativa de las operaciones de simetría y nos permite concluir que cualquier operación espacial puede construirse<sup>2</sup> como una combinación de  $\{\hat{I} \mid \mathbf{R}\}$ ,  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  y  $\{\hat{A}' \mid \tau\}$ .

---

<sup>1</sup>Este tipo de movimientos en el sistema de referencia se encuentra necesariamente asociado a **operadores lineales ortogonales** (es decir, que conservan la **norma** en el producto escalar) y **no singulares**, lo cual se traduce en que las operaciones puntuales tomen siempre la forma de matrices regulares con determinante igual a 1 al actuar sobre vectores y funciones.

<sup>2</sup>Cfr. [Chen85]

Mediante la simple inspección de sus propiedades respecto a la composición, es posible demostrar que todos los operadores de simetría  $\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}$  que dejan invariante al sistema constituyen un **grupo** en el sentido algebraico del término, al que nos referiremos como **grupo espacial del sistema** o simplemente grupo  $\mathcal{G}$ . Dentro de ese grupo, consideremos ahora el conjunto de las operaciones del tipo  $\{\hat{I} \mid \mathbf{R}\}$ , es decir, las traslaciones en un vector de red. Este conjunto forma un **subgrupo invariante** del grupo espacial y recibe el nombre de **grupo de traslaciones** o grupo  $\mathcal{T}$ . Por otro lado, el conjunto de las operaciones puntuales  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  y  $\{\hat{A}' \mid \mathbf{0}\}$  tiene a su vez estructura de grupo, constituyendo el denominado **grupo puntual isogonal** del grupo  $\mathcal{G}$  o grupo  $\mathcal{G}_0$  a secas. Obviamente, este grupo  $\mathcal{G}_0$  será también un subgrupo de  $\mathcal{G}$  cuando sea posible encontrar<sup>3</sup> un origen de coordenadas en el que  $\tau = \mathbf{0}$  para todas las operaciones del tipo  $\{\hat{A}' \mid \tau\}$ . En ese caso, y en razón de su similitud estructural con  $\mathcal{G}_0$ , diremos que  $\mathcal{G}$  es un grupo **simórfico**. Con independencia de que se asuma o no esa suposición en lo tocante a  $\mathcal{G}$ , el conjunto  $\mathcal{G}/\mathcal{T}$  de los **cosets** obtenidos al efectuar la descomposición de  $\mathcal{G}$  bajo  $\mathcal{T}$  constituye un grupo isomorfo a  $\mathcal{G}_0$  al que se suele denominar **grupo factor**.

Consideremos ahora un operador vectorial genérico  $\hat{C}$  que verifica la siguiente **relación de conmutación**:

$$[\hat{C}, \{\hat{I} \mid \mathbf{R}\}] = \mathbf{0} \quad (4.4)$$

En consecuencia, es posible construir una base de autofunciones  $\Psi(\mathbf{r})$  de  $\hat{C}$  que también lo sean simultáneamente de los operadores  $\{\hat{I} \mid \mathbf{R}\}$ :

$$\hat{C}\Psi(\mathbf{r}) = c\Psi(\mathbf{r}) \quad (4.5)$$

$$\{\hat{I} \mid \mathbf{R}\}\Psi(\mathbf{r}) = t(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r}) \quad (4.6)$$

Habida cuenta de la **asociatividad** entre las traslaciones, los autovalores han de cumplir

$$t(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = t(\mathbf{R})t(\mathbf{R}') \quad (4.7)$$

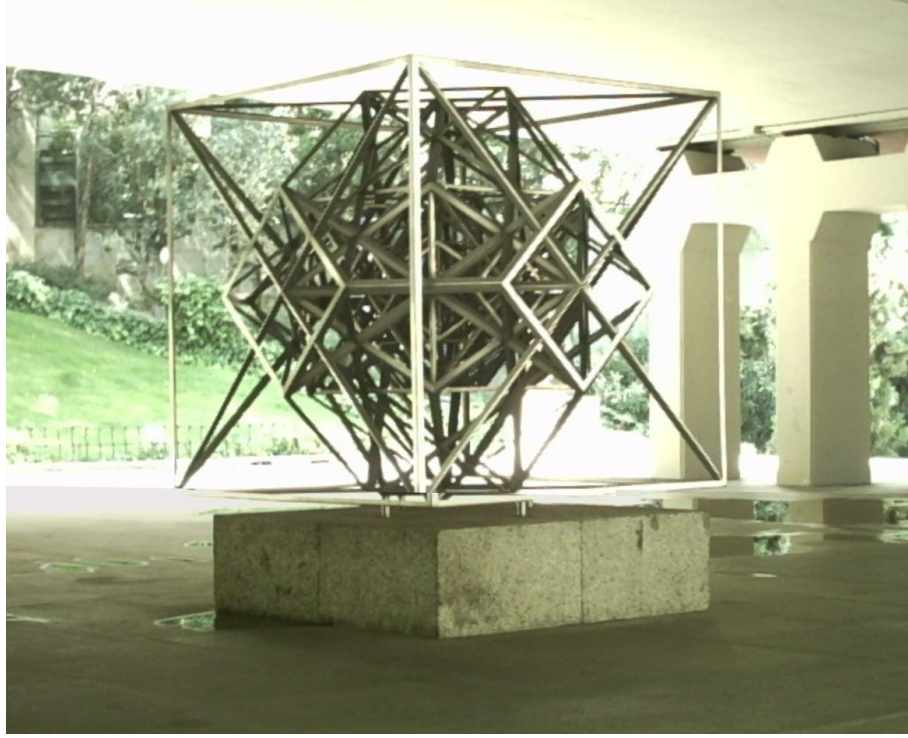
lo cual, unido a la conservación del producto escalar, impone que  $t(\mathbf{R})$  tome necesariamente la forma

$$t(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \quad (4.8)$$

Como el lector puede ya intuir, una elección adecuada de las condiciones de contorno de nuestro problema<sup>4</sup> nos permite identificar  $\mathbf{q}$  con  $\mathbf{k}$  y recuperar así el Teorema de Bloch

<sup>3</sup>Esto es, en ausencia tanto de **planos de deslizamiento** como de **ejes en espiral**

<sup>4</sup>Habitualmente, **condiciones periódicas** en las que  $\{\hat{I} \mid N_i \mathbf{a}_i\} = \{\hat{I} \mid \mathbf{0}\}$  para unos ciertos  $N_i$



**Figura 4.1 :** Fotografía de la obra *Estructuración hiperpolédrica del espacio*, creación del arquitecto Rafael Leoz (1921-1976). En su interior, podemos reconocer sin ningún género de dudas la peculiar forma de la Primera Zona de Brillouin correspondiente a una red cúbica centrada en las caras.

como una propiedad necesaria de los autoestados comunes de ambos operadores.

#### 4.2.2. Autofunciones y operadores de simetría

Según lo establecido en el apartado anterior, las autofunciones del operador  $\hat{C}$  pueden expresarse en la forma

$$\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.9)$$

siendo  $\mathbf{k}$  un vector de onda dentro de la primera Zona de Brillouin y  $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  una función vectorial invariante bajo  $\mathcal{T}$ . Consideremos ahora la acción sobre  $\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$  de una operación puntual  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \in \mathcal{G}_0$ :

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n = \tilde{A} e^{i\mathbf{k}\cdot\tilde{A}^{-1}\mathbf{r}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\tilde{A}^{-1}\mathbf{r}) \quad (4.10)$$

Teniendo en cuenta que  $\mathcal{G}_0$  es, con carácter general, un subgrupo del **grupo puntual holosimétrico**<sup>5</sup> del sistema, las funciones  $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  también serán invariantes bajo  $\mathcal{G}_0$ . Si

<sup>5</sup>También llamado grupo puntual “de la red vacía” o grupo  $\mathcal{P}$ . Véase [Chen85] para más detalles.



a eso añadimos la ya mencionada ortogonalidad de las matrices  $\tilde{A}$ , la expresión anterior se transforma en

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n = \tilde{A} e^{i\tilde{A}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.11)$$

Dado un vector de onda  $\mathbf{k}$ , su **pequeño co-grupo**<sup>6</sup>  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  se define como el conjunto de operaciones de simetría que satisfacen la relación

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{q}' \quad (4.12)$$

siendo  $\mathbf{q}'$  es un vector de red recíproca. En consecuencia, si  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  forma parte de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ ,

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n = \tilde{A} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \underbrace{e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}} \tilde{A} \varphi_{n\mathbf{k}}}_{\phi_{n\mathbf{k}}} \quad (4.13)$$

Así pues, al actuar sobre  $\Psi_{\mathbf{k}}^n$ , el operador  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  nos proporciona otra función Bloch con el mismo vector de onda  $\mathbf{k}$  que la original.

Si ahora aplicamos el operador de simetría en ambos lados de la ecuación (4.5) recordando nuestra premisa inicial de que conmuta con  $\hat{C}$ , tenemos que

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \hat{C} \Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = \hat{C} \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = c_n(\mathbf{k}) \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) \quad (4.14)$$

lo que en definitiva significa que  $\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$  y  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$  son autofunciones de  $\hat{C}$  con el mismo autovalor. Suponiendo que  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}) = \{\{\hat{A}_i \mid \mathbf{0}\}\}$  sea el “pequeño co-grupo” correspondiente a un determinado vector de onda  $\mathbf{k}$ , las ecuaciones (4.13) y (4.14) nos permiten afirmar que las funciones  $\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$  deben cumplir

$$\{\hat{A}_i \mid \mathbf{0}\} \Psi_{\mathbf{k},g}^n(\mathbf{r}) = \sum_{g'} \alpha_{g,g'}^i \Psi_{\mathbf{k},g'}^n(\mathbf{r}) \quad (4.15)$$

donde  $g$  es la degeneración de los autoestados. Nuestro siguiente paso será entender el significado de los coeficientes escalares  $\{\alpha_{g,g'}^i\}$ .

### 4.2.3. Teoría de Representaciones

Mediante el formalismo usual de la Teoría de Representaciones,<sup>7</sup> es posible demostrar de forma directa que las matrices de coeficientes escalares que aparecen en la ecuación (4.15) constituyen una **representación** del grupo  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , es decir, son **homomorfos** con

<sup>6</sup>Traducción tentativa de la denominación *little co-group* introducida en [Bradley72]

<sup>7</sup>Cfr. [Falicov66]

él. Por otro lado, si consideramos que la degeneración de las autofunciones no es **accidental** (i.e. no puede eliminarse cambiando un parámetro del problema sin modificar sus propiedades de simetría) el conjunto  $\{\Psi_{\mathbf{k},g}^n(\mathbf{r})\}$  genera un **subespacio invariante**  $\mathcal{L}_{\mathbf{k}}$  irreducible bajo  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  y, por lo tanto, el conjunto de matrices  $\{\tilde{\alpha}^i\}$  es una **representación irreducible** de dicho grupo. Si  $\{\hat{A}_i \mid \mathbf{0}\}$  pertenece a la **clase de equivalencia**  $m$  dentro de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , debe cumplirse que

$$\sum_g \alpha_{g,g}^i = \chi_m^R \quad (4.16)$$

donde  $\chi_m^R$  es el **carácter** correspondiente a la clase  $m$  para una determinada representación irreducible  $R$  del grupo  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .

Por otro lado, suponiendo las ya mencionadas condiciones periódicas de contorno, resulta trivial demostrar que el grupo de las traslaciones es isomorfo con un **grupo cíclico abeliano** y, en consecuencia, que todas sus representaciones irreducibles son unidimensionales. Puesto que, para cualquier elemento de  $\mathcal{T}$ , se verifica

$$\{\hat{I} \mid \mathbf{R}\} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.17)$$

es inmediato identificar la fase  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$  con el carácter de una determinada representación irreducible del grupo  $\mathcal{T}$ , a la que, como es lógico, le asignaremos la etiqueta  $\mathbf{k}$ .

#### 4.2.4. En resumen...

Con el objeto de recuperar el hilo de nuestra exposición, parece oportuno resumir brevemente lo que se ha venido exponiendo hasta aquí sobre las operaciones de simetría en sistemas periódicos:

1. Dado un cierto sistema invariante bajo las traslaciones de una red de Bravais, podemos encontrar otras operaciones de simetría (puntuales o no) que también mantienen invariante su descripción. El conjunto de unas y otras constituye el grupo espacial  $\mathcal{G}$  de dicho sistema.
2. Mediante las técnicas de la teoría de grupos, es posible demostrar que
  - a) el conjunto  $\mathcal{T}$  de las traslaciones primitivas es un subgrupo invariante de  $\mathcal{G}$
  - b) si factorizamos  $\mathcal{G}$  en los cosets del grupo de traslaciones, el conjunto resultante  $\mathcal{G}/\mathcal{T}$  también es un grupo, que se denomina factor y es isomorfo con el grupo isogonal  $\mathcal{G}_0$

3. Como consecuencia de todo lo anterior, las autofunciones de un operador  $\hat{C}$  que conmute con los elementos de  $\mathcal{G}$  pueden construirse mediante la combinación de una representación irreducible  $\mathbf{k}$  de  $\mathcal{T}$  con unas ciertas representaciones irreducibles<sup>8</sup> de  $\mathcal{G}/\mathcal{T}$ , concretamente las que forman parte de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}) \subset \mathcal{G}_0$ .
4. Y en el caso de que  $\mathcal{G}$  sea simórfico, las representaciones irreducibles de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  coinciden además con las de uno de los 32 **grupos puntuales cristalográficos**.

Llegamos así a la conclusión de que el análisis de las propiedades de simetría constituye una herramienta muy potente para la resolución de cualquier problema de autovalores, al permitirnos escoger de antemano la base de funciones más adecuada. Ni que decir tiene que, tras la oportuna identificación de  $\hat{C}$  con el operador hamiltoniano, ese ha venido siendo principalmente el papel de las técnicas de grupos de simetría<sup>9</sup> en campos tales como la física atómica o la física del estado sólido. Nada nos impide, sin embargo, adoptar un punto de vista complementario: dado que cada  $R$  tiene asociado unívocamente su propio conjunto de caracteres, es posible emplear las representaciones irreducibles de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  para clasificar, asignándole la etiqueta de la  $R$  que le corresponda, la  $n$ -ésima autofunción del operador  $\hat{C}$  en el punto  $\mathbf{k}$ , una vez calculada ésta mediante algún procedimiento que no tenga en cuenta explícitamente las simetrías del problema. Como es bien sabido, este enfoque alternativo se ha utilizado ampliamente para la determinación de **reglas de selección** en múltiples problemas de física atómica y molecular en los que la interacción radiación-materia juega un papel destacado.<sup>10</sup>

Tal y como ya se adelantó al comienzo del capítulo, la caracterización *a posteriori* de las propiedades de simetría de los autoestados del campo electromagnético nos será de gran utilidad para la comprensión de la respuesta óptica de los cristales fotónicos. Pero antes de entrar en más detalles, no nos vendrá mal dedicar una sección previa a la descripción operativa de cómo llevar a cabo dicha tarea.

## 4.3. Caracterización de las propiedades de simetría

### 4.3.1. Evaluación del carácter de las representaciones en $\mathcal{L}_{\mathbf{k}}$

El camino más corto a la hora de asignar una representación  $R$  a las distintas autofunciones dentro del subespacio invariante  $\mathcal{L}_{\mathbf{k}}$  pasa sin duda por la evaluación directa

<sup>8</sup>Adviértase lo útil de esta propiedad a la hora de, por ejemplo, decidir si nos “fiamos” de la degeneración de un autovalor calculado numéricamente.

<sup>9</sup>Desarrolladas en paralelo a la evolución de la mecánica cuántica, como atestiguan los trabajos pioneros de [Seitz36] y [Bouckaert36]

<sup>10</sup>Cfr. [Bransden98] y las referencias allí incluidas.

de la traza de las matrices que aparecen en la ecuación (4.15). Así, en el caso de las representaciones irreducibles unidimensionales ( $g = 1$ ), el carácter  $\chi_M^R$  vendrá dado por la expresión

$$\chi_M^{R_{1D}} = \alpha = \frac{\mathbf{P} \cdot \Psi}{|\Psi|^2} \quad (4.18)$$

en la que el símbolo  $\mathbf{P}_g \equiv \{\hat{\mathbf{A}} \mid \mathbf{0}\} \Psi_g$  representa a la autofunción transformada. Mediante una cierta manipulación algebraica, no es difícil obtener<sup>11</sup> una expresión similar para las representaciones en dos y tres dimensiones, si bien en este último caso resulta conveniente definir unas variables auxiliares con el objeto de hacer más compacta la notación:

$$\chi_M^{R_{2D}} = \sum_{j,k} \frac{(-1)^{j+k} [(\mathbf{P}_j \cdot \Psi_k)(\Psi_k \cdot \Psi_j) - (\mathbf{P}_j \cdot \Psi_j)|\Psi_k|^2]}{|\Psi_1|^2 |\Psi_2|^2 - (\Psi_1 \cdot \Psi_2)(\Psi_2 \cdot \Psi_1)} \quad (4.19)$$

$$\chi_M^{R_{3D}} = \frac{\mathbf{w}_1 \cdot (\mathbf{v}_2 \times \mathbf{v}_3) + \mathbf{v}_1 \cdot (\mathbf{w}_2 \times \mathbf{v}_3) + \mathbf{v}_1 \cdot (\mathbf{v}_2 \times \mathbf{w}_3)}{\mathbf{v}_1 \cdot (\mathbf{v}_2 \times \mathbf{v}_3)} \quad (4.20)$$

$$(\mathbf{v}_i)_j \equiv \Psi_i \cdot \Psi_j \quad (4.21)$$

$$(\mathbf{w}_i)_j \equiv \mathbf{P}_i \cdot \Psi_j \quad (4.22)$$

Como último detalle, no podemos olvidar que, en el caso de haber sido obtenidas numéricamente, las autofunciones  $\Psi$  no verificarán la ecuación (4.15) más que en una forma aproximada, por lo que, para estar seguros de la asignación de un determinado carácter a una cierta autofunción, deberemos implementar algún tipo de promedio sobre el conjunto discreto de puntos del espacio en los que conozcamos su valor.

#### 4.3.2. De la simetría de las autofunciones a la simetría de las bandas

Si en la sección 4.2 volvíamos sobre nuestros pasos para justificar la validez del Teorema de Bloch, introducido sin más contemplaciones en el Capítulo 2, nada nos impide ahora definir *a posteriori* la  $n$ -ésima “banda” en la dirección  $\overline{K_1 K_2}$  como el conjunto formado por los  $n$ -ésimos autovalores del operador  $\hat{\mathbf{C}}$  etiquetados con un vector  $\mathbf{k}$  que varía de forma continua<sup>12</sup> deslizándose sobre el segmento que une a los **puntos especiales**  $K_1$  y  $K_2$  dentro de la 1ª ZB. Como es bien sabido, tales puntos deben su calificativo al hecho de que los grupos  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_1)$  y  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_2)$  contienen operaciones puntuales distintas de la identidad y eso hace posible la aparición de degeneraciones no accidentales de los au-

<sup>11</sup>Véase [López-Tejiera02].

<sup>12</sup>En contraposición con los **niveles discretos** de un sistema finito. Es este carácter continuo de  $c(\mathbf{k})$  el que origina, de hecho, el nombre de “banda”.

tovalores. Para responder de forma rigurosa a la interesante cuestión de qué sucede con los puntos intermedios, resulta conveniente enunciar<sup>13</sup> un **Teorema de Construcción** de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  que nos permita determinar el “pequeño co-grupo” asociado a un  $\mathbf{k}$  genérico:

**Teorema de Construcción de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .** *Si  $K_1$  y  $K_2$  son dos puntos dentro de la parte irreducible de la  $1^a$  ZB, cualquier otro punto  $\mathbf{k}$  situado sobre el segmento que los une tendrá el mismo “pequeño co-grupo”  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , concretamente el formado por todas las operaciones comunes a  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_1)$  y  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_2)$  que además verifiquen*

$$\left. \begin{aligned} \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_1 &= \mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \\ \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}' \end{aligned} \right\} \text{ con } \mathbf{q} = \mathbf{q}'$$

Este práctico teorema tiene además dos implicaciones de gran importancia que podemos expresar a modo de corolarios:

**Corolario I.** *Para cualesquiera  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}''$  situados sobre el segmento que une  $\mathbf{k}_1$  con  $\mathbf{k}_2$ , se cumple que*

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}' - \mathbf{k}' = \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}'' - \mathbf{k}'' = \mathbf{q} \quad (4.23)$$

*si la operación  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  está contenida en  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .*

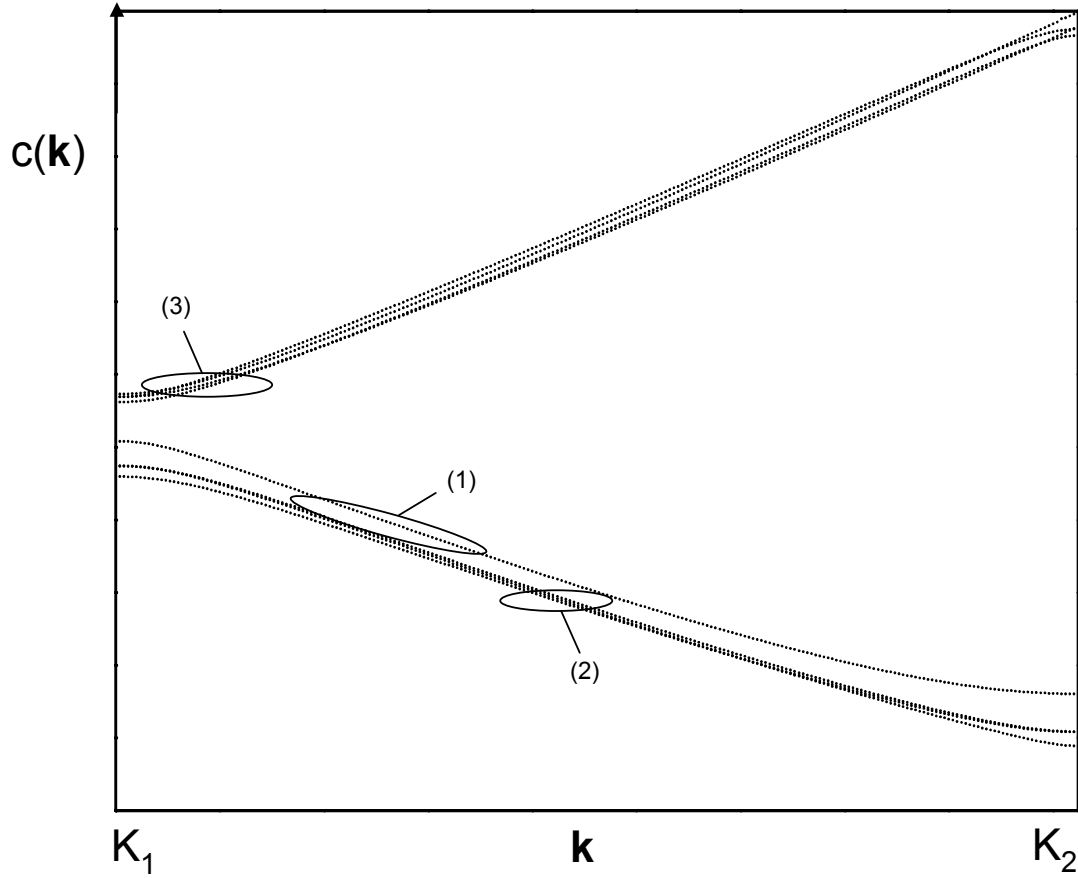
**Corolario II.** *Para cualesquiera  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}''$  situados sobre el segmento que une  $K_1$  con  $K_2$  tales que*

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{k}'' &= \mathbf{k}' + \delta\mathbf{k} \\ |\delta\mathbf{k}| &\ll \min\{|\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''|\} \\ c_{n''}(\mathbf{k}'') &\approx c_{n'}(\mathbf{k}') \end{aligned} \right.$$

*se cumple que si el conjunto de autofunciones  $\{\Psi_{\mathbf{k}',g}^{n'}(\mathbf{r})\}$  es una representación irreducible  $R$  de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , el conjunto  $\{\Psi_{\mathbf{k}'',g}^{n''}(\mathbf{r})\}$  también lo es.*

Como consecuencia de ambos corolarios, no sólo las representaciones irreducibles **son las mismas** para cualquier  $\mathbf{k}$  en el segmento sino que además se “**conservan**” a lo largo del mismo, por lo que cobra sentido hablar de la representación irreducible asociada una cierta banda. De hecho, esa representación de la banda se convierte en el último ingrediente necesario para completar su propia definición: la(s) autofunción(es) asociada(s) a todo autovalor que forme parte de una determinada banda debe(n) constituir una misma representación irreducible del grupo  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , por lo que no tendremos ningún problema en “seguir” la banda a través de todos los **cruc**es y **anticruc**es que pudieran presentarse a lo largo del segmento.

<sup>13</sup>Sin entrar aquí en la demostración, que sí puede consultarse en el Apéndice A



**Figura 4.2 :** Representación gráfica de un conjunto discreto de pares de valores  $\{\mathbf{k}_i, c(\mathbf{k}_i)\}$ . Aunque la definición de la banda no plantea ninguna dificultad en **(1)**, resulta extraordinariamente difícil en **(2)** y **(3)**, a causa de la existencia de autovalores muy próximos para vectores de onda adyacentes.

El único precio que deberemos pagar por esta restricción sobre nuestra idea original es que el índice  $n$  tenga que asignarse de forma convencional en alguno de los extremos de  $\overline{K_1 K_2}$ , al poder tomar valores distintos para cada  $\mathbf{k}$ . Eso tampoco supone mayor problema, sobre todo si consideramos las indudables ventajas que, de cara a la resolución de las bandas, nos supone la nueva definición, ya que, con carácter general, no dispondremos de una expresión analítica para  $c(\mathbf{k})$  y deberemos conformarnos con una interpolación sobre un conjunto discreto de pares de valores  $\{\mathbf{k}_i, c(\mathbf{k}_i)\}$ , teniendo que enfrentarnos por tanto con el tipo de dificultades de las que la Fig. 4.2 es un buen ejemplo: mientras que definir la banda como una curva continua no supone ningún problema en **(1)**, no puede decirse lo mismo de las zonas **(2)** y **(3)**, donde, respectivamente, se entremezclan series de dos y cuatro autovalores. Es en estas zonas conflictivas donde las representaciones

irreducibles nos serán de gran ayuda, bien mediante la evaluación directa de las expresiones (4.18) a (4.20), bien mediante la utilización de argumentos más generales como el de que la degeneración accidental entre dos bandas unidimensionales sólo es posible si éstas tienen distinta representación<sup>14</sup> o el uso de las **relaciones de compatibilidad**<sup>15</sup> entre las representaciones irreducibles de puntos contiguos con distinto  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .

#### 4.4. Aplicación al caso del campo electromagnético

Ha llegado, pues, el momento de aplicar al campo electromagnético nuestras extensas consideraciones sobre las propiedades de simetría en un problema de autovalores genérico. Para ello, el primer paso será reescribir las ecuaciones (2.18) y (2.19) en una forma más acorde con el lenguaje que hemos venido manejando a lo largo del capítulo:

$$\hat{\Xi}_1 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \equiv \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \equiv \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \hat{\Xi}_2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (4.24)$$

$$\hat{\Theta} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \equiv \nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (4.25)$$

No es difícil (aunque sí algo tedioso) demostrar que cualquier operación de simetría que mantenga invariante la descripción de  $\varepsilon(\mathbf{r})$  dentro de la celda unidad conmuta con los operadores diferenciales  $\hat{\Xi}_1$ ,  $\hat{\Xi}_2$  y  $\hat{\Theta}$ , lo cual nos permite aplicar a los autoestados de (4.24) y (4.25) el procedimiento de clasificación descrito en las secciones anteriores.

Conviene precisar, no obstante, que las expresiones explícitas de los caracteres que se presentaron en la sección 4.3.1 sólo son válidas para campos vectoriales en el sentido estricto del término y deben modificarse convenientemente (esto es, en función del tipo de operación de simetría que se considere) para su uso con el campo  $\mathbf{H}$ , habida cuenta de que vectores y **pseudovectores** presentan un comportamiento opuesto con respecto a la **inversión**. Como la forma compacta de las expresiones (4.18)-(4.20) resulta muy conveniente para su evaluación numérica, suele ser más práctico efectuar la caracterización de las bandas a partir de las propiedades de simetría del campo  $\mathbf{E}$ , con independencia del procedimiento empleado para resolver las ecuaciones de Maxwell. En cualquier caso, una vez determinada la representación irreducible de un  $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}^n$  dado, es inmediato conocer la del correspondiente  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^n$  y viceversa.<sup>16</sup>

<sup>14</sup>Eso es una consecuencia directa de la independencia lineal entre las autofunciones degeneradas, sin necesidad de recurrir a las tan populares afirmaciones sobre la “atracción” o “repulsión” entre bandas.

<sup>15</sup>Derivadas de la reducción de las representaciones del grupo de mayor orden respecto a las del menor (que es siempre un subgrupo del primero), según el procedimiento que se detalla en el Apéndice B.

<sup>16</sup>Cfr. [Ohtaka96]

Dejando de lado ese tipo de detalles técnicos, la pregunta obvia una vez completada (o más bien, antes de iniciar) la caracterización de las propiedades de simetría de un determinado sistema es, sin duda, cuál puede ser su utilidad práctica, ya que no parece lógico que un mero ejercicio académico justifique tanto esfuerzo. Y para responder a esa cuestión, deberemos reexaminar uno de los problemas clave presentados en el Capítulo 2: el cálculo de las relaciones energéticas para una onda plana con frecuencia  $\omega$  que incide sobre la superficie de discontinuidad de un cristal fotónico.

Si en el apartado 2.2.2 llegábamos a la conclusión de que la parte espacial del campo transmitido podía expresarse como una superposición de las soluciones con autovalor  $\omega$  que verificasen la condición de conservación de la componente tangencial de  $\mathbf{k}$ , ahora nos gustaría saber qué otra información sobre la respuesta espectral del sistema podemos extraer de nuestro conocimiento de sus propiedades de simetría. Pero antes de abordar ese punto, nos será de gran ayuda presentar un último resultado formal de la Teoría de Grupos, que en esta ocasión nos limitaremos a enunciar, remitiendo a [Cornwell84] al lector interesado en su demostración:

**Teorema.** *Dado un grupo  $\mathcal{G}$  de operaciones de simetría, cualquier función vectorial “con un comportamiento razonable”<sup>17</sup> puede expresarse como una combinación lineal de funciones base de sus representaciones irreducibles, es decir*

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \sum_m^{d_{\alpha}} c_m^{\alpha} \Psi_m^{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (4.26)$$

donde  $\Psi_m^{\alpha}(\mathbf{r})$  se transforma como la  $m$ -ésima fila de la representación irreducible  $R^{\alpha}$  de  $\mathcal{G}$ , los coeficientes  $c_m^{\alpha}$  son en general complejos y el sumatorio en  $\alpha$  se extiende al conjunto de todas las representaciones irreducibles de  $\mathcal{G}$ .

Por otra parte, si consideramos cada una de dichas representaciones, es posible definir el **operador de proyección** de sus caracteres como

$$\hat{P}^{\beta} \equiv \frac{d_{\beta}}{g} \sum_{i=1}^g \chi^{\beta}(\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}_i)^* \{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}_i \quad (4.27)$$

donde  $g$  es el orden de  $\mathcal{G}$ ,  $d_{\beta}$  la dimensión de  $R^{\beta}$  y  $\chi^{\beta}(\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}_i)$  el carácter asociado a la operación  $\{\hat{A} \mid \mathbf{t}\}_i$  en esa representación. Como su propio nombre indica, este operador

---

<sup>17</sup>Eso significa que  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) \in L^2$  en la región del espacio en la que se aplica el teorema, una condición bastante fácil de cumplir para el caso que nos ocupa.



“proyecta” la función  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  en el subespacio de la representación irreducible  $R^\beta$ :

$$\hat{P}^\beta \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_m^{d_\beta} c_m^\beta \Psi_m^\beta(\mathbf{r}) \quad (4.28)$$

Puesto que tanto (4.28) como (4.26) tienen una validez completamente general, nada nos impide identificar  $\mathcal{G}$  con  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}^\parallel)$  y utilizar la descomposición en representaciones para el caso de los campos incidente, reflejado y transmitido sobre la superficie de discontinuidad de un cristal fotónico. Así, podemos reescribir (2.37), (2.39) y (2.41) en la forma

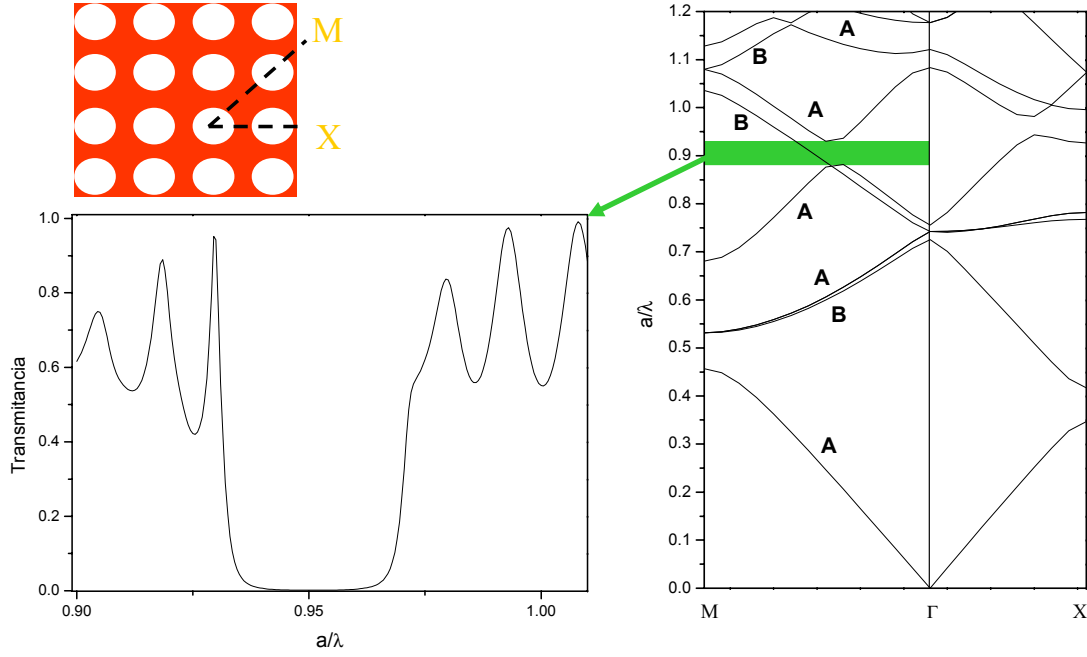
$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) &= \sum_\alpha \sum_m^{d_\alpha} a_m^\alpha [\mathbf{E}_{inc}]_m^\alpha = \sum_\alpha \sum_m^{d_\alpha} b_m^\alpha [\mathbf{E}_{trans}]_m^\alpha - \sum_\alpha \sum_m^{d_\alpha} c_m^\alpha [\mathbf{E}_{ref}]_m^\alpha \\ &= \mathbf{E}_{trans}(\mathbf{r}) - \mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.29)$$

y luego aplicar el operador de proyección en ambos lados de la ecuación:

$$\begin{aligned} \hat{P}^\beta \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) &= \sum_m^{d_\beta} a_m^\beta [\mathbf{E}_{inc}]_m^\beta = \sum_m^{d_\beta} b_m^\beta [\mathbf{E}_{trans}]_m^\beta - \sum_m^{d_\beta} c_m^\beta [\mathbf{E}_{ref}]_m^\beta \\ &= \hat{P}^\beta \mathbf{E}_{trans}(\mathbf{r}) - \hat{P}^\beta \mathbf{E}_{ref}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Imaginemos por un momento que  $\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r})$  se transforma como la representación  $R^\beta$  de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}^\parallel)$ . Entonces, es inmediato concluir de (4.29) y (4.30) que los coeficientes  $b_m^\alpha, c_m^\alpha$  son iguales a cero para todo  $\alpha \neq \beta$ . Eso quiere decir **que el campo transmitido debe tener la misma representación irreducible bajo  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}^\parallel)$  que el campo incidente**, lo cual añade una restricción adicional a los sumatorios de (2.39) y (2.41). Y si llegara a ocurrir que, para un cierto rango de energías, no existiera **ninguna** solución con las propiedades de simetría de la onda incidente, el sistema presentaría un máximo o mínimo espectral análogo a los descritos en el Capítulo 2, pero con un origen físico **completamente distinto** e imposible de explicar a partir del mero cálculo de su estructura de bandas.

Con el objeto de entender mejor a qué tipo de situación nos estamos refiriendo, consideremos el caso de una red cuadrada de cilindros “infinitos” como la que se muestra en la Fig. 4.3. Realizando una inspección cuidadosa del mismo, no tardaremos en darnos cuenta de que el grupo espacial de dicho sistema es precisamente el grupo puntual  $C_{4v}$  y, por lo tanto, todas sus autofunciones etiquetadas con un  $\mathbf{k}_{2D} = \frac{\pi}{a}(\alpha, \alpha)$  para  $\alpha \in (0, 1)$  deben transformarse como las representaciones irreducibles del grupo  $C_2$ , su “pequeño co-grupo” correspondiente. Puesto que las ecuaciones de Maxwell pueden reducirse a dos



**Figura 4.3 :** Comparación entre la estructura de bandas y el espectro de transmitancia, calculados ambos suponiendo una polarización TM, a lo largo de la dirección  $\Gamma\bar{M}$  en una estructura cuadrada de cilindros de aire rodeados por PbO ( $\varepsilon = 2.72$ ), con un factor de llenado del 58.3 %. Puede observarse que la transmitancia cae a cero en el intervalo de frecuencias sin soluciones compatibles con la simetría de la onda incidente. Los valores de los parámetros están tomados de [Sakoda95].

problemas escalares independientes cuando el vector de incidencia se encuentra contenido en el plano 2D, nos limitaremos a estudiar el caso de la polarización TM. En efecto, las bandas fotónicas calculadas a lo largo de la dirección  $\Gamma\bar{M}$  presentan un comportamiento simétrico ( $\chi = 1$ ) o antisimétrico ( $\chi = -1$ ) respecto a las operaciones del grupo  $C_2$ , tal y como señalan, respectivamente, las letras “A” y “B” en la parte derecha de la figura. Dado que también es posible comprobar<sup>18</sup> que las representaciones de tipo “A” son las únicas compatibles con la de una onda plana incidente, cabría esperar la aparición de un máximo (mínimo) espectral en el intervalo de frecuencias (destacado en color verde sobre la estructura de bandas) en el que todas las autofunciones son de tipo “B”. Y como puede apreciarse en el espectro de transmisión adjunto, calculado para 32 capas de cilindros, eso es precisamente lo que sucede.

Según se recoge en la cronología expuesta en la Tabla 2.1, la primera mención de la existencia de **pseudogaps efectivos** originados por la presencia de autofunciones incompatibles con la simetría del campo incidente aparece en [Robertson92], si bien la

<sup>18</sup>Una vez más, de acuerdo con el procedimiento descrito en el Apéndice B.

explicación que allí se proporciona es meramente cualitativa. Ese mismo año, N. Stefanou y sus colaboradores<sup>19</sup> introducen por vez primera el concepto de **uncoupled modes**<sup>20</sup> en sistemas 3D, tomando como ejemplo la dirección (100) de una estructura fcc. Sin embargo, no consideran necesario incluir de forma explícita la justificación de la influencia de estas bandas en las propiedades espectrales del sistema hasta otra publicación posterior, [Karathanos98], por lo que suele considerarse al ya citado [Sakoda95] como el primer trabajo en el que se describe de forma clara y rigurosa el efecto de las propiedades de simetría en la respuesta óptica de los cristales fotónicos. Muy poco tiempo después, el ínclito K. Ohtaka reaparecía después de más de diez años de silencio con una serie de tres artículos de gran extensión publicados (cómo no) en la revista *Journal of the Physical Society of Japan*, el último de los cuales<sup>21</sup> estaba dedicado a la caracterización de las propiedades de simetría de las bandas en cristales fotónicos tridimensionales, incluyendo la primera discusión sobre el papel de la polarización de la luz incidente.

A partir de ese momento, la manipulación de las propiedades de simetría del campo electromagnético abría nuevas posibilidades para la tan mentada “ingeniería de gaps”, al permitir la obtención de un número mucho mayor de intervalos de frecuencias prohibidas. Y si contemplamos el problema desde la perspectiva complementaria, resulta evidente que el estudio de las propiedades de simetría puede servirnos para facilitar la interpretación de unos espectros que, con el paso del tiempo, se han venido calculando/midiendo de una forma cada vez más precisa pero, a la par, también cada vez más desprovista de intuición física. A modo de conclusión del capítulo, no cabe decir más que, si bien en el momento de comenzar nuestros trabajos ya se había presentado la caracterización de las propiedades de simetría de las bandas fotónicas en algunos sistemas tridimensionales<sup>22</sup>, se seguían echando en falta resultados cuantitativos referidos a sistemas físicos de interés, y más en concreto, a los ópalos artificiales. Ese es el motivo por el que buena parte de nuestros esfuerzos, tanto numéricos como conceptuales, se encaminaron en esa dirección, como podrá apreciarse en la presentación de resultados.

## Referencias

- [Bouckaert36] L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski y E. Wigner. *Theory of Brillouin zones and symmetry properties of wave functions in crystals*. Physical Review **50** (1), 58–67, julio 1936.

---

<sup>19</sup>Cfr. [Stefanou92]

<sup>20</sup>Esto es, autofunciones que no pueden ser excitadas por el campo incidente

<sup>21</sup>El ya citado [Ohtaka96]

<sup>22</sup>Véanse por ejemplo [Sakoda97] y [Yuan98]

- [Bradley72] C. J. Bradley y A. P. Cracknell. *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point Groups and Space Groups*. Clarendon Press, Oxford, 1972.
- [Bransden98] B. H. Bransden y C. J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Longman, London, 1998.
- [Chen85] J. Q. Chen, M. J. Gao y G. Q. Ma. *The representation group and its application to space groups*. Reviews of Modern Physics **57**, 211–278, enero 1985.
- [Cornwell84] J. F. Cornwell. *Group Theory in Physics*, tomo I. Academic Press, London, 1ª ed<sup>ón</sup>., 1984.
- [Falicov66] L. M. Falicov. *Group Theory and Its Physical Applications*. The University of Chicago Press, Chicago, 1966.
- [Inui90] T. Inui, Y. Tanabe y Y. Onodera. *Group Theory and Its Applications in Physics*, tomo 78 de *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [Karathanos98] V. Karathanos. *Inactive frequency bands in photonic crystals*. Journal of Modern Optics **45** (8), 1751–1758, agosto 1998.
- [López-Tejeira02] F. López-Tejeira, T. Ochiai, K. Sakoda y J. Sánchez-Dehesa. *Symmetry characterization of eigenstates in opal-based photonic crystals*. Physical Review B **65**, 195110/1–8, abril 2002.
- [Ohtaka96] K. Ohtaka y Y. Tanabe. *Photonic band using vector spherical waves. III. Group-theoretical treatment*. Journal of the Physical Society of Japan **65** (8), 2670–2684, agosto 1996.
- [Robertson92] W. M. Robertson, G. Arjavalingam, R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe y J. D. Joannopoulos. *Measurement of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array*. Physical Review Letters **68** (13), 2023–2026, marzo 1992.
- [Sakoda95] K. Sakoda. *Symmetry, degeneracy and uncoupled modes in two-dimensional photonic lattices*. Physical Review B **52** (11), 7982–7986, septiembre 1995.

- [Sakoda97] K. Sakoda. *Group-theoretical classification of eigenmodes in three-dimensional photonic lattices*. Physical Review B **55** (23), 15345–15348, junio 1997.
- [Seitz36] F. Seitz. *On the reduction of space groups*. The Annals of Mathematics **37** (1), 17–28, enero 1936.
- [Stefanou92] N. Stefanou, V. Karathanos y A. Modinos. *Scattering of electromagnetic waves by periodic structures*. Journal of Physics: Condensed Matter **4**, 7389–7400, septiembre 1992.
- [Wherrett86] B. S. Wherrett. *Group Theory for Atoms, Molecules and Solids*. Prentice Hall International, Englewood Cliffs, 1986.
- [Yuan98] Z. Yuan, J. W. Haus y K. Sakoda. *Eigenmode symmetry for simple cubic lattices and the transmission spectra*. Optics Express **3** (1), 19–27, julio 1998.



# CAPÍTULO 5

## Presentación de resultados (I)

*Pereant qui ante nos nostra dixerunt.*

Atribuido a Elio Donato (s.IV dc)

Ha llegado el momento de presentar los resultados de nuestra propia investigación, comenzando por el sistema más mencionado a lo largo de la memoria: la estructura de ópalo desnudo.

### Contenido

<b>5.1. Algunas cuestiones previas . . . . .</b>	<b>107</b>
5.1.1. Un modelo sencillo para la dirección (111): la Ley de Bragg . . . . .	108
5.1.2. Hacia un índice de refracción efectivo . . . . .	110
¿Un modelo analítico para el modelo analítico? . . . . .	113
Experimentos numéricos . . . . .	114
<b>5.2. Propiedades fotónicas de los ópalos desnudos . . . . .</b>	<b>115</b>
5.2.1. Efecto de la sinterización en los pseudogaps de los puntos L y X . . . . .	115
5.2.2. Dependencia angular de la respuesta espectral en la cara {111} . . . . .	118
5.2.3. Caracterización de la simetría de los autoestados . . . . .	120
Clasificación de las bandas . . . . .	121
Autoestados inaccesibles por razones de simetría . . . . .	124
Estimación del acoplamiento con la luz incidente . . . . .	125
Efectos de la simetría en la respuesta espectral (I) . . . . .	129
Efectos de la simetría en la respuesta espectral (II) . . . . .	132
<b>5.3. Conclusiones . . . . .</b>	<b>137</b>
<b>Referencias . . . . .</b>	<b>137</b>

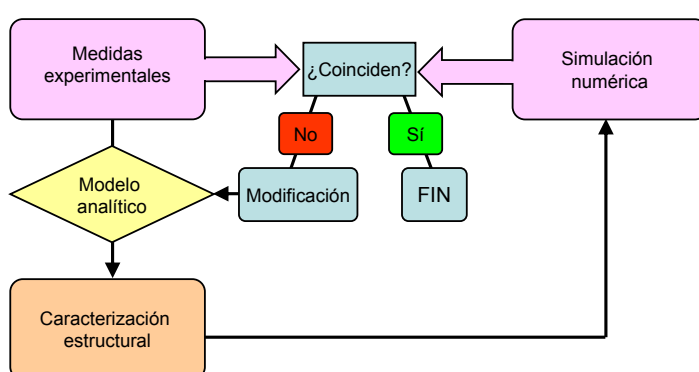




## 5.1. Algunas cuestiones previas

Antes de comenzar con la exposición de resultados propiamente dicha, parece oportuno dedicar un espacio a una cuestión metodológica que, al menos desde nuestro punto de vista, resulta de capital importancia: cómo relacionar los cálculos de bandas y espectros con las medidas ópticas experimentales en el caso particular de los sistemas auto-ensamblados y, más concretamente, en el de los ópalos artificiales. Para comprender la importancia de este asunto en toda su extensión, conviene recordar que en el esquema conceptual que hemos venido desarrollando en los capítulos precedentes se parte de las características constitutivas del sistema (tamaño, tipo de estructura cristalina, parámetro de red y función dieléctrica de sus componentes) para obtener seguidamente sus propiedades fotónicas. Sin embargo, a la hora de analizar los espectros experimentales de los ópalos deberemos seguir justamente el camino contrario, ya que dispondremos de la respuesta óptica de un cristal cuyas características estructurales (número de capas, parámetro de red etc.) nos serán desconocidas, al menos en un cierto grado, como inevitable servidumbre de la estrategia auto-organizativa.

Es en ese punto donde resulta necesaria la introducción de modelos analíticos que relacionen más o menos directamente las medidas con las características estructurales del sistema, por medio de la adopción de hipótesis que, sin arrastrar la complejidad de los cálculos microscópicos, retengan las propiedades físicas más relevantes, evitándonos el tener que recurrir a tediosos (y por lo general, inviables) procedimientos de caracterización *in situ*. En el paso siguiente, la información proporcionada por esos modelos sencillos nos servirá a su vez para “alimentar” las simulaciones numéricas detalladas, completando un proceso de autoconsistencia como el que se esquematiza en la Fig. 5.1.



**Figura 5.1 :** Representación esquemática del proceso de caracterización estructural de un sistema mediante la comparación de sus medidas ópticas con los resultados de una simulación numérica.

Precisamente por su carácter de puente entre teoría y experimento, disponer de modelos analíticos fiables adquiere una extraordinaria relevancia, ya que en caso contrario nos arriesgamos a elevar hasta el infinito el número de cálculos sin tener ninguna garantía de llegar a reproducir las medidas experimentales. En esa línea, la primera sección de este capítulo se dedica a presentar la **Ley de Bragg**, nombre con el que se conoce al modelo analítico más utilizado<sup>1</sup> a la hora de interpretar las propiedades ópticas de los ópalos artificiales y sus diversos derivados.

### 5.1.1. Un modelo sencillo para la dirección (111): la Ley de Bragg

De acuerdo con las hipótesis de este modelo, la aparición de gaps o pseudogaps en un cristal fotónico se entiende como una **perturbación** a la estructura de bandas de un sistema homogéneo equivalente caracterizado por un **índice de refracción efectivo**  $n_{eff}$  que se obtiene al promediar de algún modo los de los diversos componentes del sistema real. Y aunque eso no nos proporciona ninguna información sobre la anchura de los gaps, sí cabría esperar que la posición de sus centros coincidiese aproximadamente con la de los puntos en los que la relación de dispersión de dicho sistema equivalente

$$\frac{\omega}{c} = \frac{|\mathbf{k}_{int}|}{n_{eff}} \quad (5.1)$$

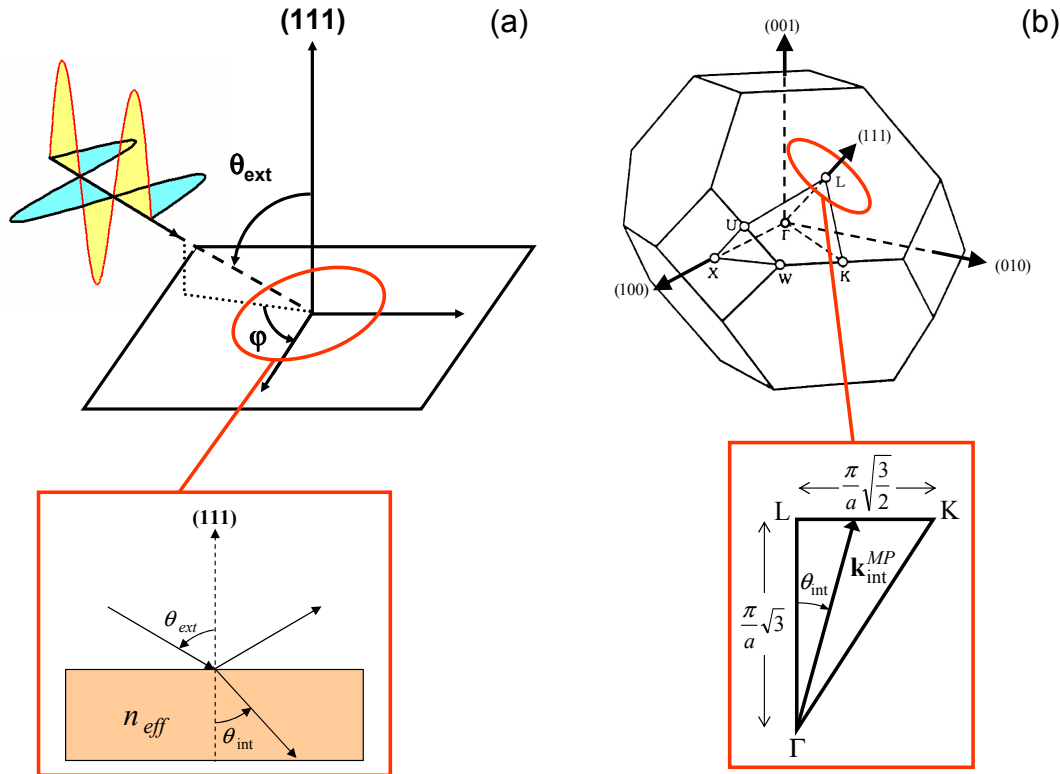
atraviesa la superficie de las sucesivas Zonas de Brillouin asociadas al grupo de traslaciones del problema original.

Teniendo cuenta que, como ya se ha señalado en los capítulos precedentes, no todos los intervalos de frecuencias prohibidas tienen su origen en fenómenos de interferencia destructiva y que las hipótesis de homogeneización, además de justificarse sólo en sistemas con bajo contraste de índices, son cada vez menos ciertas conforme se aumenta la energía, no cabe esperar que las predicciones de este modelo nos lleven demasiado lejos... pero quizá sí lo suficiente como para parametrizar la posición del primer máximo de reflectancia de un ópalo desnudo en función del ángulo de incidencia sobre la superficie de la muestra. Con la vista puesta en ese objetivo, consideremos entonces el caso particular de la dirección (111) en una red fcc,<sup>2</sup> sin necesidad de entrar por ahora en el detalle de sus características estructurales.

---

<sup>1</sup>Véanse, por ejemplo, [Vos96], [Romanov01] y [Velikov02], por citar referencias sin relación directa con nuestro propio trabajo.

<sup>2</sup>Que es precisamente la del crecimiento natural para los ópalos, según se recogía en el Capítulo 2 y en las referencias en él incluidas.



**Figura 5.2 :** (a) Representación esquemática del proceso de incidencia de una onda plana sobre la cara {111} de un estructura con simetría fcc, bajo la hipótesis de que ésta puede reemplazarse por un medio efectivo. (b) Detalle de la caracterización de  $\mathbf{k}_{int}^{MP}$  en función del parámetro de red y el ángulo de inclinación respecto a la normal.

Según puede apreciarse en la Fig. 5.2, la recta asociada a la luz que incide sobre la superficie {111} con un cierto ángulo  $\theta_{ext}$  atravesará la cara hexagonal de la Primera Zona de Brillouin en un punto  $\mathbf{k}_{int}^{MP}$  que no dependerá del **ángulo acimutal**  $\varphi$  siempre y cuando se verifique la condición  $\theta_{int} < \arctan \frac{|\mathbf{k}_{LK}|}{|\mathbf{k}_{\Gamma L}|} \approx 35.26^\circ$ . Así, tras hacer las oportunas sustituciones en la ecuación (5.1),

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)_{MP} = \frac{|\mathbf{k}_{int}^{MP}|}{n_{eff}} = \frac{|\mathbf{k}_{\Gamma L}|}{\cos \theta_{int} n_{eff}} \quad (5.2)$$

bastará con hacer explícito el valor de  $|\mathbf{k}_{\Gamma L}|$  en términos del parámetro de red  $a$  para obtener de forma casi inmediata una expresión mucho más próxima a nuestro objetivo final de relacionar la posición del máximo con las características estructurales del sistema:

$$\lambda_{MP} = \frac{2a}{\sqrt{3}} n_{eff} \cos \theta_{int} \quad (5.3)$$

Y dado que  $\frac{a}{\sqrt{3}}$  es precisamente la distancia  $d_{111}$  entre planos  $\{111\}$  adyacentes y que la hipótesis de homogeneización nos permite emplear de modo natural la **Ley de Snell** para conectar los ángulos internos y externos, eso nos conduce finalmente a la forma en la que suele expresarse usualmente la Ley de Bragg:

$$\lambda_{MP} = 2d_{111} \sqrt{n_{eff}^2 - \sin^2 \theta_{ext}} \quad (5.4)$$

Así pues, y recurriendo a consideraciones exclusivamente geométricas, hemos obtenido una parametrización analítica de la posición del primer pico Bragg de un sistema con orientación (111) en su superficie de discontinuidad en función de sus dos características estructurales más relevantes. Pero antes de ir más lejos, creemos necesario profundizar un poco más en el concepto de índice de refracción efectivo que se introdujo de forma casi subrepticia al comienzo de este apartado.

### 5.1.2. Hacia un índice de refracción efectivo

Tal y como se ponía de manifiesto ya en la primera sección del Capítulo 2, el concepto de cristal fotónico adquiere sentido cuando la modulación espacial del índice de refracción es del orden de la del campo electromagnético, de modo que si queremos alcanzar un régimen en el que nuestro sistema pueda considerarse homogéneo a los efectos de la propagación de la luz, debemos desplazar la escala de operación hasta el punto en el que las inhomogeneidades se conviertan en demasiado pequeñas para que la luz pueda “verlas”. Es en ese régimen donde deberemos caracterizar el índice de refracción efectivo de nuestro sistema, por más que luego vayamos a emplearlo en un modelo cuya validez se pretende extender<sup>3</sup> más allá del límite  $\lambda \gg a$ .

La formalización rigurosa de esta primera idea intuitiva nos conduce a la definición “canónica”<sup>4</sup> del índice de refracción efectivo de un cristal fotónico como el inverso de la pendiente de la relación de dispersión del sistema en el límite en el que  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ , es decir

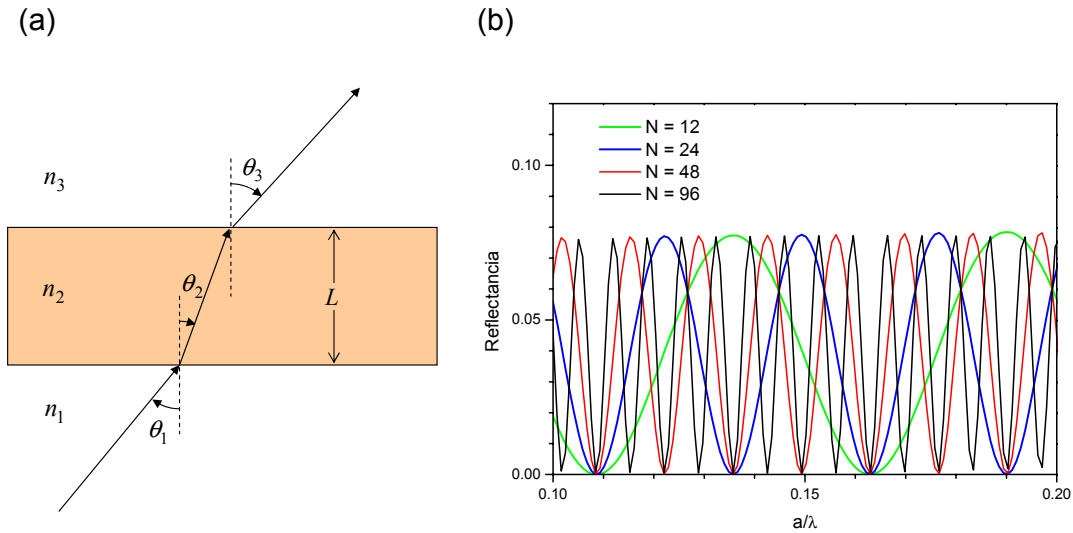
$$n_{eff}^{-1} \equiv \lim_{|\mathbf{k}| \rightarrow 0} \frac{1}{c} \frac{d\omega}{d|\mathbf{k}|} \quad (5.5)$$

Una consecuencia importante de esta definición es que el valor de  $n_{eff}$  no puede depender del tamaño del sistema, de modo que en el caso de tratar con estructuras finitas debemos de estar seguros de encontrarnos dentro del rango en el que la longitud de onda de la

---

<sup>3</sup>De hecho, con un cierto “abuso de notación”, podría decirse que  $n_{eff}$  equivale al sistema “de referencia” en un desarrollo perturbativo.

<sup>4</sup>Véase, por ejemplo, [Datta93]



**Figura 5.3 :** (a) Representación esquemática del proceso de propagación de la luz a través de una lámina dieléctrica homogénea de grosor  $L$  rodeada por dos medios semi-infinitos. (b) Espectro de reflectancia calculado para  $\theta_1 = 0$ ,  $n_2 = 1.333$  y  $n_1 = n_3 = 1$  bajo la condición adicional de que  $L$  se corresponda con un múltiplo entero  $N$  de la distancia entre planos  $\{111\}$  contiguos en una red fcc. La convergencia hacia el límite del cristal semi-infinito puede apreciarse en el progresivo aumento de la frecuencia de las oscilaciones conforme se incrementa el grosor del sistema

luz incidente sea a su vez mucho menor que la dimensión de la muestra en la dirección normal a la superficie de discontinuidad:

$$L \gg \lambda \gg a \quad (5.6)$$

Y es precisamente en el momento de abordar ese tipo de problemas en el que surge la necesidad de establecer la relación entre el índice de refracción efectivo de una estructura finita y su respuesta espectral, la única que, al fin y al cabo, nos resulta accesible a través de los experimentos, sean éstos numéricos o de laboratorio.

Supongamos un sistema como el que se representa en la Fig. 5.3a, compuesto por una lámina dieléctrica homogénea con índice de refracción  $n_2$  y grosor  $L$  que separa dos medios semi-infinitos caracterizados por los índices  $n_1$  y  $n_3$ . Como es de sobra conocido, no es difícil obtener expresiones explícitas<sup>5</sup> para la reflectancia y la transmitancia de la lámina en función de de sus parámetros característicos. Y una vez obtenidas las relaciones energéticas, nada nos impide establecer sus **condiciones de máximo o mínimo** en

<sup>5</sup>Que no vamos a reproducir aquí, remitiendo al lector interesado a [Born99].

función del **camino óptico**  $h$  en la lámina dieléctrica, definido como

$$h = n_2 L \quad (5.7)$$

Bajo la hipótesis de que  $n_2 > n_1 = n_3$ , es posible demostrar<sup>6</sup> que las condiciones de máximo para la reflectancia

$$\frac{dR}{dh} = 0; \quad \frac{d^2 R}{dh^2} < 0 \quad (5.8)$$

se reducen a que  $h$  y  $\lambda$  verifiquen la relación

$$h = \frac{m\lambda}{4 \cos \theta_2}; \quad m = 1, 3, 5 \dots \quad (5.9)$$

Si consideremos el caso de incidencia normal<sup>7</sup>, resulta inmediato obtener el valor de la reflectancia en cada uno de dichos máximos, una vez efectuadas las más que previsibles sustituciones  $n_1 = n_3 = 1$ ,  $n_2 = n_{eff}$ :

$$\text{máx } R = \left( \frac{1 - n_{eff}^2}{1 + n_{eff}^2} \right)^2 \quad (5.10)$$

Así, ya sólo resta tener en cuenta las hipótesis iniciales para llegar a una expresión explícita para  $n_{eff}$  que depende exclusivamente de la respuesta espectral del sistema:

$$(n_{eff})_i = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{(\text{máx } R)_i}}{1 - \sqrt{(\text{máx } R)_i}}} \quad (5.11)$$

Finalmente, a la vista de la condición (5.6), resulta interesante comprobar cómo la convergencia hacia el límite del cristal semi-infinito se refleja en el espectro a través de un aumento en la frecuencia de las oscilaciones al irse incrementando el grosor del sistema, según puede apreciarse en la Fig. 5.3b, en la que se ha impuesto la condición adicional de que  $L$  sea un múltiplo entero  $N$  de la distancia entre planos  $\{111\}$  contiguos de una red fcc. De hecho, si  $N$  y  $a$  fueran conocidos *a priori*, también sería posible calcular el índice de refracción efectivo a partir del **periodo espacial**  $\Delta$ , habida cuenta de que, en ese caso particular,

$$\Delta = \frac{\sqrt{3}}{2n_{eff}N} \frac{a}{\lambda} \quad (5.12)$$

---

<sup>6</sup>Véase la referencia de la nota anterior.

<sup>7</sup>Lo cual nos permite olvidarnos de especificar la polarización.

### ¿Un modelo analítico para el modelo analítico?

Aunque el propósito del apartado anterior consistiera en presentar un método para obtener el índice de refracción efectivo de un cristal fotónico finito, tampoco está de más recordar el **Primer Principio Moral de Wheeler**<sup>8</sup> y plantearnos la posibilidad de conocer al menos el orden de magnitud de  $n_{eff}$  antes de embarcarnos en modelo analítico o numérico alguno.

La propuesta más simple para el índice de refracción efectivo de un sistema compuesto por esferas dieléctricas dispuestas en un medio homogéneo es sin duda el promedio entre sus respectivos índices de refracción  $n_s$  y  $n_b$  en razón de la fracción de volumen  $f$  que ocupa cada material:

$$n_{eff} = \langle n \rangle \equiv (1 - f)n_b + fn_s \quad (5.13)$$

Tampoco parece mala idea postular una suerte de promedio cuadrático a partir de las funciones dieléctricas de cada material, bajo la hipótesis de que  $n = \sqrt{\varepsilon}$ , algo bastante razonable en el caso de sistemas no dispersivos.

$$n_{eff} = \sqrt{\langle \varepsilon \rangle} \equiv \sqrt{(1 - f)\varepsilon_b + f\varepsilon_s} \quad (5.14)$$

Y puestos a incluir de forma específica el carácter esférico de sus componentes, qué mejor que recurrir a un modelo más sofisticado como el que nos proporciona la **fórmula de Maxwell-Garnett**<sup>9</sup>:

$$n_{eff} = n_{eff}^{MG} \equiv \sqrt{\varepsilon_b \left( \frac{2\varepsilon_b + \varepsilon_s + 2f(\varepsilon_s - \varepsilon_b)}{2\varepsilon_b + \varepsilon_s - f(\varepsilon_s - \varepsilon_b)} \right)} \quad (5.15)$$

Veamos qué valor de  $n_{eff}$  nos proporciona cada uno de estos modelos en el caso de una estructura fcc compacta ( $f = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.7405$ ) de esferas de SiO<sub>2</sub> ( $n = 1.45$ ) en aire:

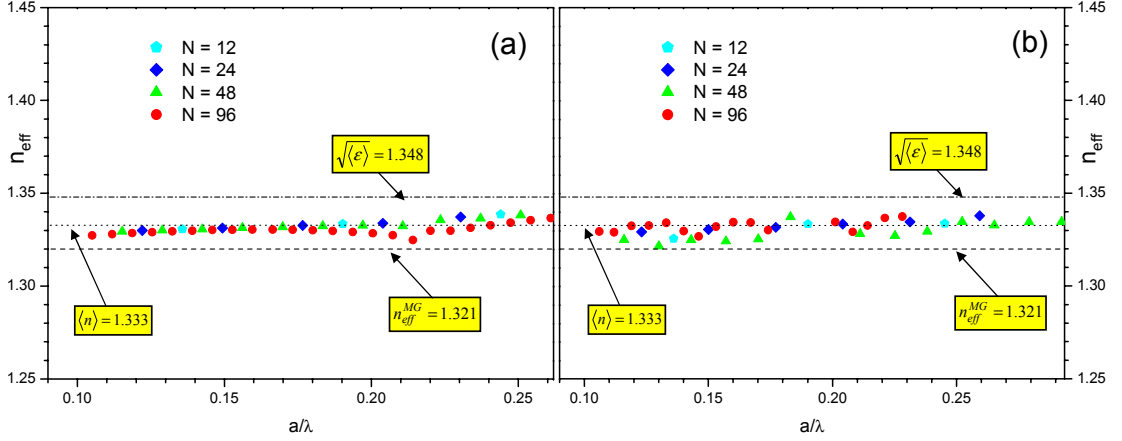
$$\langle n \rangle = 1.333; \quad \sqrt{\langle \varepsilon \rangle} = 1.348; \quad n_{eff}^{MG} = 1.321$$

Como puede apreciarse, la dispersión de los tres resultados es muy pequeña y apunta a un valor real próximo al de  $\langle n \rangle$ . Esperemos que eso nos sirva de ayuda para movernos en el siempre resbaladizo terreno de los experimentos numéricos.

---

<sup>8</sup>Nos referimos, claro está, al famosísimo *Never make a calculation until you know the answer* recogido, entre otros, en [Taylor66]

<sup>9</sup>Cfr. [Lamb80] y [Moroz99]



**Figura 5.4 :** Valores del índice de refracción efectivo de un ópalo artificial obtenidos al aplicar la fórmula (5.11) a espectros TMM **(a)** y layer-KKR **(b)** calculados para varios grosores de la muestra en el caso de incidencia normal. Las líneas discontinuas indican las estimaciones de  $n_{eff}$  proporcionadas por los distintos modelos analíticos. Puede apreciarse que la distribución de valores está centrada en el índice promedio  $\langle n \rangle$ , actuando  $\sqrt{\langle \epsilon \rangle}$  y  $n_{eff}^{MG}$  como las cotas superior e inferior, respectivamente.

### Experimentos numéricos

Como aplicación práctica de lo hasta ahora expuesto, vamos a intentar estimar el índice de refracción efectivo correspondiente a un ópalo desnudo “perfecto” haciendo uso de la expresión (5.11) en el rango de energías en el que la respuesta espectral de dicho sistema es similar a la de una lámina homogénea:

En la Fig. 5.4 se muestran los valores de  $n_{eff}$  obtenidos a partir de los máximos de reflectancia cuya amplitud no excede en más de un 5 por ciento<sup>10</sup> a la del más próximo a la energía  $\frac{a}{\lambda} = 0.1$  en los espectros TMM y layer-KKR calculados en incidencia normal<sup>11</sup> para distintos valores de  $L$ , todos ellos múltiplos enteros de la distancia  $d_{111}$ . Según puede apreciarse en la figura, la distribución de valores está centrada en el índice promedio  $\langle n \rangle$  incluso para aquellos valores de  $N$  (12 y 24) que no cumplen *a priori* la condición  $L \gg \lambda$  en el rango de energías considerado, mientras que las estimaciones  $\sqrt{\langle \epsilon \rangle}$  y  $n_{eff}^{MG}$  hacen las veces de cota superior e inferior, respectivamente.<sup>12</sup> Por lo que a la comparación entre los resultados TMM y layer-KKR se refiere, sólo cabe consignar que la dispersión de los valores de  $n_{eff}$  en torno a  $\langle n \rangle$  es apreciablemente mayor para estos últimos, algo que quizá esté en relación con los problemas de convergencia a baja energía descritos en el Capítulo 3, si bien tal extremo no ha sido objeto de un estudio

<sup>10</sup>Ese ha sido el criterio operacional escogido para delimitar el régimen de respuesta homogénea.

<sup>11</sup>Alcanzándose en ambos casos los límites computacionales descritos en el Capítulo 3.

<sup>12</sup>Tal y como ya habían señalado previamente otros trabajos, por ejemplo [Moroz99].



exhaustivo. Así pues, podemos concluir que el valor  $\langle n \rangle = 1.333$  constituye una excelente aproximación al índice de refracción efectivo de un ópalo desnudo, lo cual establecería en un valor ligeramente por encima de los  $50^\circ$  el límite para el que la Ley de Bragg debería poder proporcionarnos la posición del primer máximo de reflectancia.

## 5.2. Propiedades fotónicas de los ópalos desnudos

En esta sección se exponen el conjunto de nuestra investigación sobre las propiedades fotónicas de los ópalos desnudos, dividida en tres partes bien diferenciadas.

### 5.2.1. Efecto de la sinterización en los pseudogaps de los puntos L y X

Según se expuso en el Capítulo 2 de la memoria, el bajo contraste de índices entre  $\text{SiO}_2$  y aire no hace posible la aparición de un gap completo en los ópalos desnudos, por lo que el principal interés de este sistema desde un punto de vista fotónico reside en su uso como base para la fabricación de estructuras inversas. Y puesto que lo importante es el contraste, no es difícil entender que una de las claves para el éxito de la empresa resida en la completa eliminación de la matriz de  $\text{SiO}_2$  una vez rellenos con un nuevo material los huecos entre las esferas, usualmente por medio de un ataque químico.<sup>13</sup>

La eficacia de ese procedimiento depende, sin embargo, de la existencia de “cuellos” de conexión entre las esferas, ya que son éstos los que permiten al disolvente alcanzar las capas más internas del material al tiempo que actúan como “desagüe” para los restos de  $\text{SiO}_2$ . Como esa condición es difícil de satisfacer si los únicos puntos de contacto entre esferas contiguas son los prescritos por la condición de empaquetamiento compacto de la red fcc, resulta necesario prolongar la sinterización del ópalo desnudo hasta que el desplazamiento de  $\text{SiO}_2$  dentro de la muestra aumenta suficientemente la sección de contacto entre las esferas. Ese proceso se traduce tanto en un incremento del factor de llenado del sistema<sup>14</sup> como en una disminución de su parámetro de red. Y dado que tales modificaciones también han de reflejarse en las propiedades ópticas del ópalo sinterizado, la respuesta espectral de este último puede servirnos para establecer el grado de idoneidad de una muestra con vistas a posteriores procesos de inversión.

---

<sup>13</sup>Véase, por ejemplo, [Blanco01]

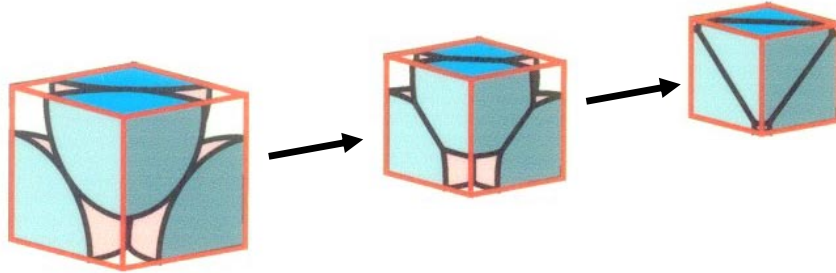
<sup>14</sup>De hecho, es posible utilizar este procedimiento para obtener cualquier valor de  $f$  en el intervalo 74-100 %, según se detalla en la referencia [Míguez98].

La forma más sencilla de abordar el efecto de la sinterización en los ópalos desnudos consiste, finalmente, en estudiar el comportamiento de las bandas en  $L$  y  $X$ , ya que los primeros pseudogaps en dichos puntos pueden identificarse de modo automático con los picos de reflectancia de las caras  $\{111\}$  y  $\{100\}$  en condiciones de incidencia normal.

Como es lógico, la implementación numérica del proceso representado en la Fig. 5.5 puede abordarse de muy distintas formas, entre las que nosotros escogimos el aumento progresivo del radio de las esferas sin alterar la posición relativa de sus centros.<sup>15</sup> No podemos dejar de señalar, sin embargo, que esa forma de proceder no incorpora explícitamente la relación de causalidad entre la contracción del parámetro de red y el incremento de la fracción de llenado. De hecho, suponiendo que  $a_{cp}$  y  $R_{cp}$  sean, respectivamente, el parámetro de red y el radio de las esferas en el caso de empaquetamiento compacto, cualquier  $R' > R_{cp}$  constituye una violación de la conservación de la cantidad de  $\text{SiO}_2$  en el sistema a menos que el parámetro de red también se reescale en el sentido opuesto, una circunstancia que deberemos manejar con cautela a la hora de interpretar los resultados. Resulta, pues, conveniente definir un **factor de escala**  $\eta$

$$\eta = \frac{a'}{a_{cp}} = \frac{R_{cp}}{R'} \leq 1 \quad (5.16)$$

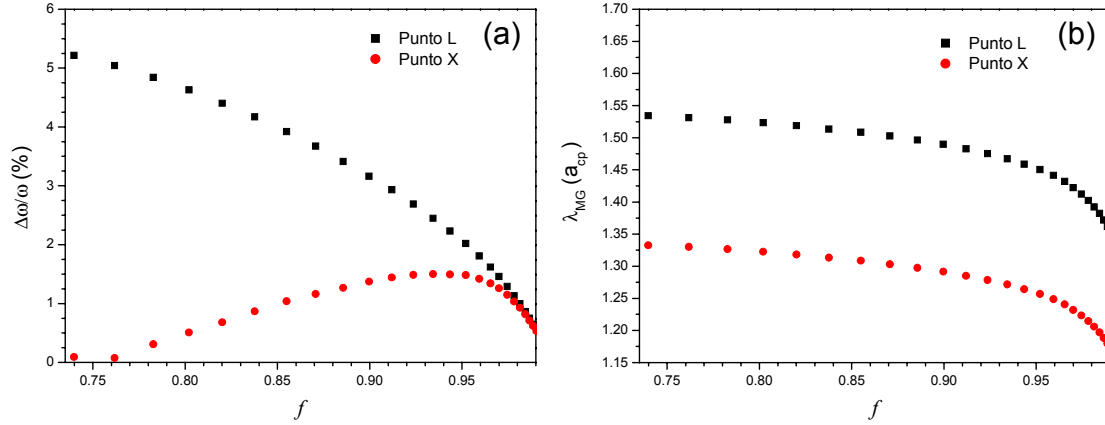
que nos será de gran ayuda para entender el sentido de los desplazamientos del máximo de reflectancia a lo largo del proceso de sinterización, habida cuenta de los valores de la energía que nos proporcionarán los cálculos ya no estarán expresados en términos de  $\frac{a_{cp}}{\lambda}$  sino en las unidades de  $\frac{a'}{\lambda}$  asociadas al factor de llenado correspondiente.<sup>16</sup>



**Figura 5.5 :** Representación esquemática del proceso de sinterización: al contraerse el parámetro de red, las esferas se interpenetran hasta que la estructura se transforma en un medio vítreo uniforme.

<sup>15</sup>Remitimos a la referencia [Busch98] al lector interesado en otras posibilidades.

<sup>16</sup>Adviértase, en todo caso, que un ejemplo de esta situación ya había sido mostrado en la Fig. 3.11 sin hacer ninguna mención en el texto, aunque sí en el pie de la figura.



**Figura 5.6 :** (a) Anchura relativa del primer pseudogap en los puntos  $L$  y  $X$  como función del factor de llenado. (b) Longitud de onda asociada al centro del primer pseudogap en los puntos  $L$  y  $X$  como función del factor de llenado. (Reelaboración de la Fig. 5 en [Reynolds99])

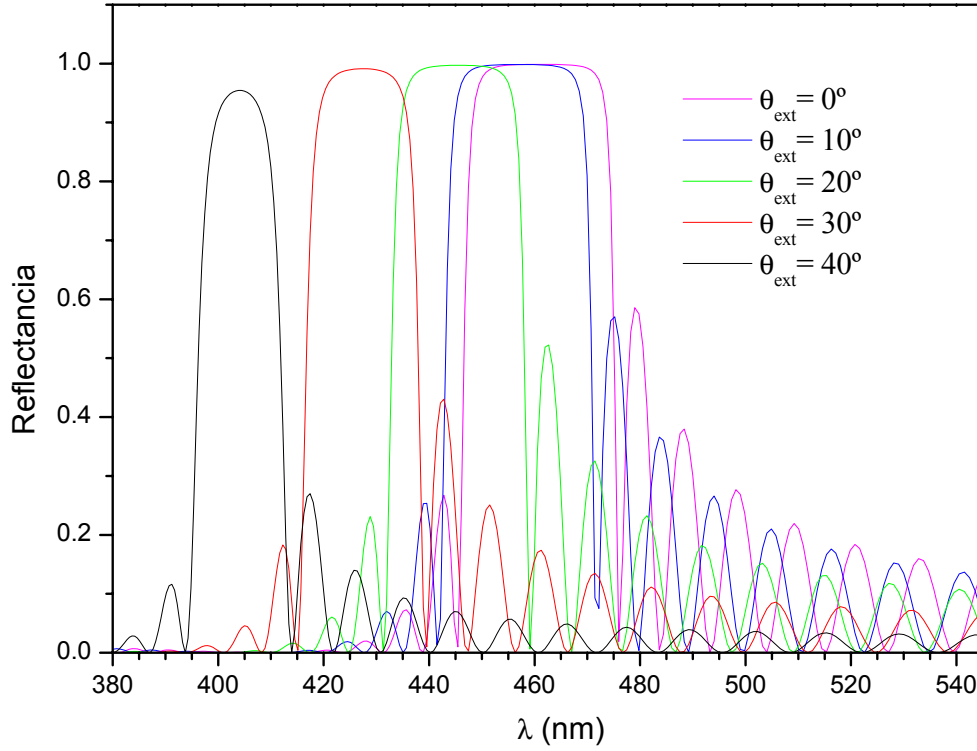
Ha llegado, pues, el momento de discutir los resultados de nuestro estudio, del que también podría destacarse que constituye la única aplicación práctica de las técnicas FDTD a lo largo de la memoria:

La Fig. 5.6a recoge el comportamiento de la anchura relativa del pseudogap en distintos momentos del proceso de sinterización. Puede observarse que mientras en el caso del punto  $L$  dicha anchura disminuye de forma monótona conforme desaparece el espacio entre las esferas, la correspondiente al punto  $X$  se incrementa desde un valor muy próximo a cero hasta un máximo cercano al 1.5 % en el entorno de  $f = 0.95$  para luego volver a caer a su valor inicial. Este diferente comportamiento permitiría el uso de la anchura en  $L$  como un test fiable para el grado de sinterización de la estructura, algo que no sería posible hacer en  $X$  por el carácter bivaluado de  $\frac{\Delta\omega}{\omega}$  frente a  $f$ .

En la Fig. 5.6b se muestra la posición del centro del pseudogap en  $X$  y  $L$ , expresada en términos del parámetro  $a_{cp}$  tras aplicar el factor de escala definido en (5.16). El comportamiento en ambas direcciones es ahora idéntico y consiste en el “corrimiento hacia el azul” que también aparece en los espectros experimentales.<sup>17</sup> Este resultado viene a confirmar que la contracción del parámetro de red desempeña un papel predominante frente al aumento del índice de refracción efectivo asociado al incremento de la fracción de volumen de  $\text{SiO}_2$ , un incremento que *a priori* podría llevarnos a pensar en un desplazamiento justo en el sentido contrario.

Concluye así el apartado sobre los efectos de la sinterización, primera etapa de nuestro análisis de las propiedades fotónicas de los ópalos desnudos.

<sup>17</sup>Cfr. [Míguez98] y [Míguez99]

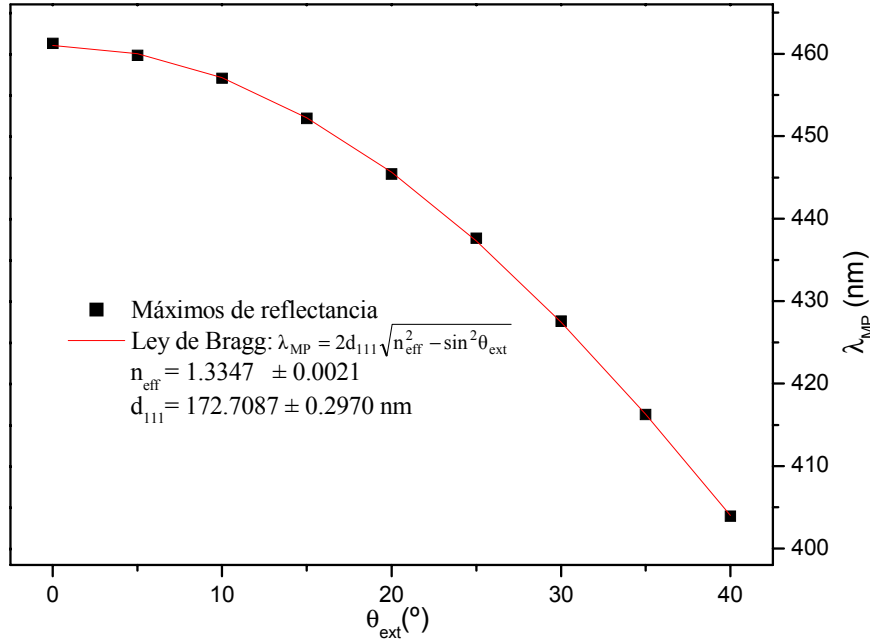


**Figura 5.7 :** Dependencia angular de la reflectancia en la cara  $\{111\}$  de un ópalo desnudo con  $L = 48d_{111}$  y  $d_{111} = 100\sqrt{3} \text{ nm}$ . Los espectros se han calculado mediante el método layer-KKR suponiendo una polarización  $p$  en la luz incidente. Para mayor claridad, sólo se muestran los resultados correspondientes a 0, 10, 20, 30 y 40 grados, pudiendo apreciarse el progresivo desplazamiento hacia la zona de mayor energía.

### 5.2.2. Dependencia angular de la respuesta espectral en la cara $\{111\}$

El siguiente aspecto abordado por nuestra investigación fue la dependencia angular en los espectros de reflectancia de la cara  $\{111\}$  de los ópalos, que es la directamente accesible para las medidas ópticas. Con ese propósito, se calcularon los espectros correspondientes a diversos ángulos de incidencia mediante dos métodos numéricos independientes (TMM y layer-KKR), manteniéndonos siempre por debajo del hipotético límite estimado al final del apartado anterior. Un ejemplo de los espectros así obtenidos se reproduce en la Fig. 5.7, caracterizada por el inequívoco desplazamiento de la posición del máximo hacia longitudes de onda cada vez menores conforme se incrementa el ángulo de incidencia. También es de destacar que en ningún momento pudo apreciarse dependencia alguna con el ángulo acimutal.

Puesto que todo parece apuntar a que los espectros de reflectancia de los ópalos desnudos presentan un comportamiento acorde con la Ley de Bragg, un ajuste numérico



**Figura 5.8 :** Valores de  $\lambda_{MP}$  en función de  $\theta_{ext}$ , obtenidos a partir de los espectros en la Fig. 5.7 mediante el criterio de la anchura correspondiente a la mitad de la altura del máximo. La línea continua muestra el resultado del ajuste por medio de la Ley de Bragg.

de los mismos a partir de la fórmula (5.4) debería ser capaz de recuperar los valores empleados como condiciones iniciales en cada caso. Para comprobar este extremo, se procedió al cálculo<sup>18</sup> del espectro de reflectancia correspondiente a una estructura fcc compacta de esferas de  $\text{SiO}_2$  ( $\varepsilon = 2.104$ ) con  $d_{111} = 100\sqrt{3} \text{ nm}$ , considerando tres diferentes grosores ( $L = 24d_{111}$ ,  $L = 48d_{111}$  y  $L = 96d_{111}$ ) de la muestra para los ángulos de incidencia comprendidos entre 0 y 40 grados sexagesimales, tomados de cinco en cinco. Con el objeto de explorar todos los posibles grados de libertad del problema, se consideraron las dos posibles polarizaciones<sup>19</sup> de la onda plana incidente, si bien la Ley de Bragg no las tiene en cuenta *a priori*.

Para cada una de las 12 posibles combinaciones de los parámetros se obtuvo un conjunto de espectros similar al de la Fig. 5.7. A continuación, se determinó el valor de  $\lambda_{MP}$  en cada caso recurriendo al criterio estándar de identificar la anchura del pseudogap (111) con la correspondiente a la mitad de la altura del máximo,<sup>20</sup> para después proceder al cálculo de  $n_{eff}$  y  $d_{111}$  por medio de un **ajuste no-lineal Levenberg-Marquardt** como el que se muestra en la Fig. 5.8.

<sup>18</sup>Mediante las dos técnicas ya mencionadas.

<sup>19</sup>s ó p, definidas según el criterio de [Reitz86]

<sup>20</sup>Véanse, por ejemplo, [Thijssen99] y [vanDriel00].

En la Tabla 5.1 se recogen los valores de  $n_{eff}$  y  $d_{111}$  obtenidos para cada configuración junto con su correspondiente margen de error estadístico.<sup>21</sup> Con independencia de la polarización y el método de cálculo empleado, el ajuste reproduce los valores “reales” del sistema cuando  $L = 96d_{111}$ , límite en el que parece posible reconciliar el tamaño finito de la muestra con la periodicidad inherente a las hipótesis del modelo Bragg.

**Tabla 5.1 :** Resultados del ajuste de los parámetros  $n_{eff}$  y  $d_{111}$  a partir de espectros de reflectancia numéricos en un ópalo artificial con  $d_{111} = 100\sqrt{3}$  nm  $\approx$  173.2051 nm. Los superíndices de los parámetros  $n_{eff}$  y  $d_{111}$  hacen referencia a la polarización de la luz incidente.

TMM				
$N$	$n_{eff}^s \pm \Delta n_{eff}^s$	$n_{eff}^p \pm \Delta n_{eff}^p$	$d_{111}^s \pm \Delta d_{111}^s$ (nm)	$d_{111}^p \pm \Delta d_{111}^p$ (nm)
24	$1.3358 \pm 0.0027$	$1.3330 \pm 0.0010$	$173.9448 \pm 0.3862$	$174.2165 \pm 0.1445$
48	$1.3131 \pm 0.0094$	$1.3218 \pm 0.0084$	$175.4334 \pm 1.3839$	$174.1300 \pm 1.2251$
96	$1.3334 \pm 0.0037$	$1.3335 \pm 0.0018$	$173.3135 \pm 0.5316$	$173.3604 \pm 0.2515$
KKR				
$N$	$n_{eff}^s \pm \Delta n_{eff}^s$	$n_{eff}^p \pm \Delta n_{eff}^p$	$d_{111}^s \pm \Delta d_{111}^s$ (nm)	$d_{111}^p \pm \Delta d_{111}^p$ (nm)
24	$1.3439 \pm 0.0022$	$1.3330 \pm 0.0021$	$172.0483 \pm 0.3101$	$173.4642 \pm 0.2977$
48	$1.3447 \pm 0.0023$	$1.3347 \pm 0.0021$	$171.3647 \pm 0.3245$	$172.7087 \pm 0.2970$
96	$1.3284 \pm 0.0071$	$1.3292 \pm 0.0054$	$173.5221 \pm 1.0261$	$173.3340 \pm 0.7817$

Podemos dar, pues, por terminado el estudio con la certeza de que la Ley de Bragg puede aplicarse con garantías a la caracterización de ópalos desnudos,<sup>22</sup> una circunstancia que, según se pondrá de manifiesto en la última parte de la sección, nos facilitará considerablemente la tarea de relacionar las propiedades ópticas de sistemas reales y estructuras periódicas perfectas.

### 5.2.3. Caracterización de la simetría de los autoestados

Sin lugar a dudas, la principal contribución de nuestro trabajo a la comprensión de las propiedades ópticas de los ópalos desnudos consiste en la clasificación sistemática<sup>23</sup> de los autoestados del campo electromagnético en ese tipo de estructura mediante las técnicas expuestas en el Capítulo 4.

<sup>21</sup>Suponiendo que los valores de  $\lambda_{MP}$  pueden considerarse “exactos” hasta la cuarta cifra decimal.

<sup>22</sup>Algo ya comprobado empíricamente en trabajos anteriores, como, por ejemplo, [Míguez97]

<sup>23</sup>Cfr. [López-Tejira02]

### Clasificación de las bandas

El primer paso para llevar a cabo dicha clasificación consiste en determinar los distintos “pequeños co-grupos” que establecen las representaciones irreducibles permitidas para los autoestados con un cierto vector de onda  $\mathbf{k}$  en una red fcc, independientemente de su realización física concreta. En la Tabla 5.2 se detallan<sup>24</sup> los grupos de operaciones asociados tanto a los vértices como a los correspondientes segmentos intermedios de la parte irreducible de la Primera Zona de Brillouin representada en la Fig. 5.2, respetando la disposición convencional de las estructuras de bandas.

**Tabla 5.2 :** Lista de los “pequeños co-grupos” asociados tanto a los vértices como a los correspondientes segmentos intermedios de la parte irreducible de la 1ª ZB en una red fcc, de acuerdo a la notación de Schönflies y el orden convencional de presentación de las estructuras de bandas. Las componentes cartesianas de los vectores representativos se expresan en unidades de  $2\pi/a$ .

Etiqueta	Vector $\mathbf{k}$ representativo	$\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$
$\overline{XU}$	(1, 1/8, 1/8)	$C_{2v}$
$U$	(1, 1/4, 1/4)	$C_{2v}$
$\overline{LU}$	(3/4, 3/8, 3/8)	$C_{1h}$
$L$	(1/2, 1/2, 1/2)	$D_{3d}$
$\overline{\Gamma L}$	(1/4, 1/4, 1/4)	$C_{3v}$
$\Gamma$	(0, 0, 0)	$O_h$
$\overline{\Gamma X}$	(1/2, 0, 0)	$C_{4v}$
$X$	(1, 0, 0)	$D_{4h}$
$\overline{XW}$	(1, 1/4, 0)	$C_{2v}$
$W$	(1, 1/2, 0)	$D_{2d}$
$\overline{WK}$	(7/8, 5/8, 0)	$C_{1h}$
$K$	(3/4, 3/4, 0)	$C_{2v}$

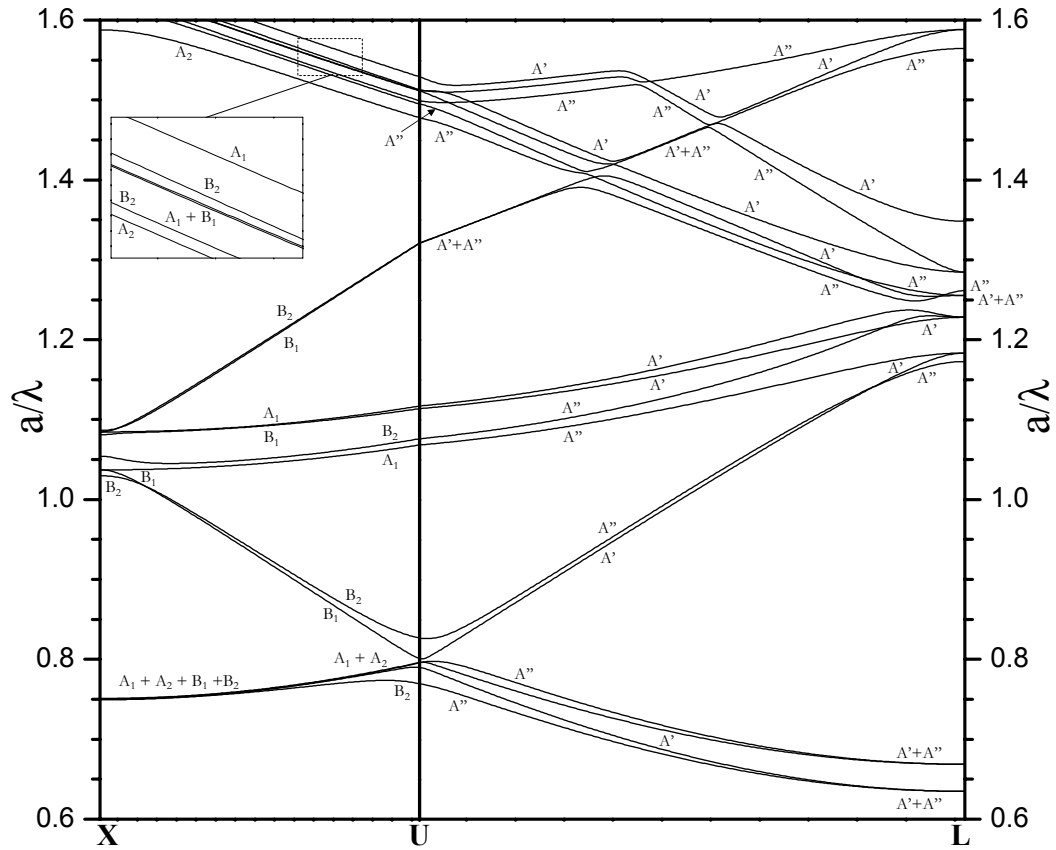
Por otra parte, una vez asignada a un autoestado una cierta representación irreducible en uno de los puntos con más alta simetría, es posible recurrir a las relaciones de compatibilidad<sup>25</sup> para determinar la representación de los autoestados con vectores  $\mathbf{k}$  adyacentes, a través del estudio de la reducción en el número de operaciones puntuales que se produce al pasar de un cierto  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  a los diversos subgrupos en él contenidos.

En las Figs. 5.9 y 5.10 se reproduce la estructura de bandas fotónicas correspondiente a un ópalo desnudo (es decir, una estructura fcc compacta de esferas de  $\text{SiO}_2$  en aire) ya presentada en el Capítulo 3, pero esta vez incluyendo la representación irreducible asociada a cada banda hasta una energía próxima a 1.6 en unidades de  $\frac{a}{\lambda}$ . Queremos

<sup>24</sup>De acuerdo con la **notación de Schönflies**.

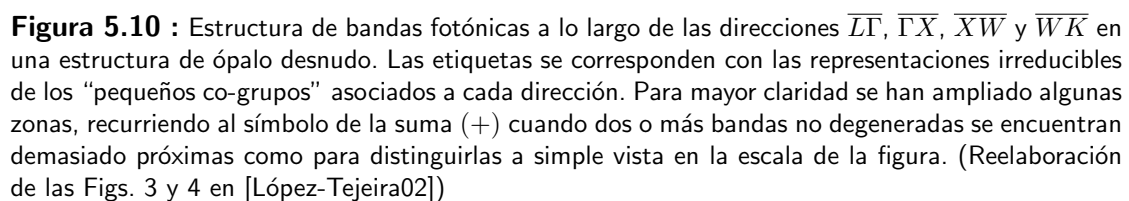
<sup>25</sup>Para más detalles, consúltese el Apéndice B.

destacar que en el proceso de su determinación se ha intentado reducir al máximo la evaluación numérica de los autoestados mediante las expresiones (4.18)-(4.20), recurriendo en la medida de lo posible a las ya citadas relaciones de compatibilidad.



**Figura 5.9 :** Estructura de bandas fotónicas a lo largo de las direcciones  $\overline{XU}$  y  $\overline{UL}$  en una estructura de ópalo desnudo. Las etiquetas se corresponden con las representaciones irreducibles de los “pequeños co-grupos” asociados a cada dirección. Para mayor claridad se han ampliado una cierta zona, recurriendo al símbolo de la suma (+) cuando dos o más bandas no degeneradas se encuentran demasiado próximas como para distinguirlas a simple vista en la escala de la figura. (Reelaboración de la Fig. 2 en [López-Tejiera02])





**Tabla 5.3 :** Representaciones irreducibles asociadas a los 20 primeros autovalores de un ópalo desnudo con vectores de onda situados en los vértices de la parte irreducible de la 1ª ZB. Los “pequeños co-grupos” correspondientes se indican entre corchetes.

$\Gamma[O_h]$	$X[D_{4h}]$	$L[D_{3d}]$	$U[C_{2v}]$	$W[D_{2d}]$	$K[C_{2v}]$
T <sub>1u</sub>	E <sub>u</sub>	E <sub>g</sub>	B <sub>2</sub>	A <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>
T <sub>1g</sub>	E <sub>g</sub>	E <sub>u</sub>	B <sub>1</sub>	E	B <sub>1</sub>
E <sub>u</sub>	A <sub>2g</sub>	A <sub>1u</sub>	A <sub>1</sub>	B <sub>1</sub>	A <sub>1</sub>
T <sub>2u</sub>	E <sub>g</sub>	E <sub>u</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>
E <sub>g</sub>	B <sub>1g</sub>	E <sub>g</sub>	B <sub>1</sub>	E	B <sub>1</sub>
T <sub>1u</sub>	B <sub>1u</sub>	A <sub>1g</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>
T <sub>2g</sub>	E <sub>u</sub>	E <sub>g</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>
T <sub>2u</sub>	A <sub>2u</sub>	A <sub>2g</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>
	B <sub>2u</sub>	E <sub>u</sub>	A <sub>1</sub>	E	A <sub>1</sub>
	A <sub>1u</sub>	A <sub>2u</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>1</sub>
	B <sub>1g</sub>	A <sub>2g</sub>	B <sub>1</sub>	A <sub>1</sub>	B <sub>1</sub>
	E <sub>u</sub>	E <sub>g</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>
	E <sub>g</sub>	E <sub>u</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>1</sub>	A <sub>2</sub>
	B <sub>2g</sub>		A <sub>2</sub>	E	A <sub>2</sub>
			B <sub>2</sub>		B <sub>2</sub>
			B <sub>1</sub>		B <sub>1</sub>
			A <sub>1</sub>		A <sub>1</sub>
			B <sub>2</sub>		B <sub>2</sub>
			A <sub>1</sub>		A <sub>1</sub>
			B <sub>1</sub>		B <sub>1</sub>

Finalmente, para no recargar aún más las figuras y en aras de la completitud, la Tabla 5.3 consigna la lista de las representaciones irreducibles para los 20 primeros autovalores en los vértices de la parte irreducible de la Primera Zona de Brillouin, ordenados de menor a mayor.

### Autoestados inaccesibles por razones de simetría

Según se adelantaba en el Capítulo 4, la aparición de pseudogaps efectivos originados por la presencia de autofunciones cuya representación no forma parte de la del campo incidente es un hecho conocido casi desde el mismo inicio de los trabajos en el campo de los cristales fotónicos, aunque su estudio y caracterización ha distado mucho de ser sistemático.<sup>26</sup> Comenzaremos, pues, esta sección explicando con cierto detalle cómo es posible detectar la presencia de ese tipo de fenómenos a partir de una caracterización de las propiedades de simetría como la llevada a cabo para la estructura de ópalo desnudo.

<sup>26</sup>Remitimos una vez más a las referencias ya mencionadas.

Consideremos una vez más la situación descrita en la Fig. 5.2a en la que una onda plana incide sobre la cara  $\{111\}$  de una estructura fcc genérica. Nada nos impide entonces definir un sistema de referencia en el que el eje  $z$  coincida con la dirección normal a la superficie, de modo que el campo incidente pueda expresarse en términos de la base definida por los vectores

$$\{\mathbf{v}_1=[1, 0, 0]e^{ik_z z}; \mathbf{v}_2=[0, 1, 0]e^{ik_z z}\} \quad (5.17)$$

Pero, por otra parte, esa misma base debe constituir, de acuerdo con el teorema enunciado en la Sección 4.4, una representación, reducible o irreducible, del “pequeño co-grupo”  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}^{\parallel})$  correspondiente, que para el caso de incidencia normal no es otro que el  $C_{3v}$ . Y la forma más directa de determinar cuál es exactamente la representación asociada a  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$  pasa por aplicar a estos vectores las operaciones puntuales de dicho grupo:

$$\{\hat{C}_{3z}|\mathbf{0}\}[1, 0, 0]e^{ik_z z} = \left[-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right]e^{ik_z z} \quad (5.18)$$

$$\{\hat{C}_{3z}|\mathbf{0}\}[0, 1, 0]e^{ik_z z} = \left[-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0\right]e^{ik_z z} \quad (5.19)$$

$$\{\hat{\sigma}_v|\mathbf{0}\}[1, 0, 0]e^{ik_z z} = [-1, 0, 0]e^{ik_z z} \quad (5.20)$$

$$\{\hat{\sigma}_v|\mathbf{0}\}[0, 1, 0]e^{ik_z z} = [0, 1, 0]e^{ik_z z} \quad (5.21)$$

Según puede deducirse de (5.18)-(5.21), las trazas de las matrices de transformación son, respectivamente,

$$\chi(\{\hat{C}_{3z}|\mathbf{0}\}) = -1; \quad \chi(\{\hat{\sigma}_v|\mathbf{0}\}) = 0 \quad (5.22)$$

lo cual determina que la representación de la base sea precisamente la denotada con la letra E. Así pues, podemos concluir que sólo las bandas con esa etiqueta resultarán accesibles para el campo que incida normalmente sobre la superficie del sistema.

Lamentablemente, la caracterización de las bandas a lo largo de la dirección  $\overline{\Gamma L}$  que se muestra en la parte superior izquierda de la Fig. 5.10 no refleja la existencia de ningún intervalo de energías en el que los **autoestados inaccesibles** no “convivan” con otros que no lo son, circunstancia que descarta por completo la posibilidad de encontrar en los espectros de reflectancia alguna traza de los tan mentados pseudogaps efectivos.

### Estimación del acoplamiento con la luz incidente

Dadas las circunstancias tan poco favorables que concurren en el caso de incidencia normal sobre la cara  $\{111\}$  de un ópalo desnudo, la única forma de comprobar la validez

de nuestro análisis sobre los autoestados no accesibles consiste en efectuar una estimación cuantitativa del **acoplamiento** del campo incidente con las diversas autofunciones disponibles, ya que, de estar en lo cierto, dicho acoplamiento debería ser nulo para todas las bandas asociadas a las representaciones  $A_1$  y  $A_2$  del grupo  $C_{3v}$ .

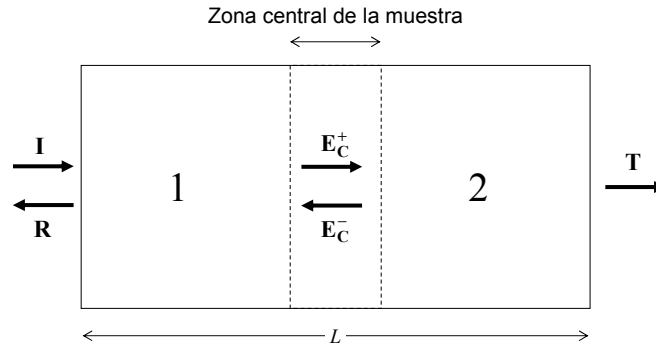
De acuerdo con lo expuesto en el Capítulo 3, la expansión layer-KKR constituye el método más eficiente para llevar a cabo nuestro propósito, así que comenzaremos reformulando ligeramente el problema de autovalores de (3.75) a la par que hacemos explícita la diferencia entre los autovalores “por la izquierda” y “por la derecha” que ya se planteaba en las ecuaciones (3.37) y (3.38)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{dra}^+(N+1) \\ \mathbf{E}_{dra}^-(N+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}^I - \tilde{Q}^{II}[\tilde{Q}^{IV}]^{-1}\tilde{Q}^{III} & \tilde{Q}^{II}[\tilde{Q}^{IV}]^{-1} \\ -[\tilde{Q}^{IV}]^{-1}\tilde{Q}^{III} & [\tilde{Q}^{IV}]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{dra}^+(N) \\ \mathbf{E}_{dra}^-(N) \end{pmatrix} \\ = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{dra}^+(N) \\ \mathbf{E}_{dra}^-(N) \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

imponiendo (una vez más) que ambos conjuntos de autofunciones verifiquen la correspondiente relación de ortonormalidad:

$$(\mathbf{E}_{izq}^\alpha)^\dagger \mathbf{E}_{dra}^{\alpha'} = \delta_{\alpha,\alpha'} \quad (5.24)$$

Imaginemos una situación como la que se presenta en la Fig. 5.11. No es difícil entender que el campo  $\mathbf{E}_C$  en el espacio entre dos planos de esferas consecutivos descrito por (3.72) debe aproximarse a una combinación lineal de los autoestados de volumen del sistema cuando dichos planos están lo suficientemente lejos de sus superficies de discontinuidad.



**Figura 5.11** : Representación esquemática de la geometría empleada para el cálculo de los coeficientes de acoplamiento.

Por tanto, si queremos estimar el “peso” de un cierto autoestado  $\mathbf{E}^\alpha$  en el campo de dentro de la muestra, bastará con calcular su solape con  $\mathbf{E}_C$ :

$$s_\alpha \equiv (\mathbf{E}_{izq}^\alpha)^\dagger \mathbf{E}_C \quad (5.25)$$

Sin embargo, el auténtico sentido físico de los coeficientes  $s_\alpha$  no reside en su valor absoluto,<sup>27</sup> sino en el relativo con respecto al resto de autoestados cuyos valores de  $\omega$  y  $\mathbf{k}$  también verifican las condiciones de conservación enunciadas en el Capítulo 2. Resulta entonces conveniente definir la denominada **branching ratio**,<sup>28</sup>

$$b_\alpha = \frac{|s_\alpha|^2}{\sum_{\alpha'} |s_{\alpha'}|^2} \quad (5.26)$$

auténtica medida del “peso” de cada  $\mathbf{E}^\alpha$  como consecuencia de la condición  $\sum_\alpha b_\alpha = 1$ . Pero antes de llegar a ese punto, necesitamos conocer el valor del campo en la zona central de la muestra:

Dada una configuración como la de la Fig. 5.11, intentaremos valernos de las relaciones entre los campos de planos contiguos definidas por (3.73) y (3.74) para obtener una expresión explícita de  $\mathbf{E}_C$  en términos de los campos incidente y transmitido a través de las matrices de scattering asociadas a las partes anterior y posterior del sistema. Así, podemos definir el campo incidente por la izquierda de la muestra como

$$\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \mathbf{E}_{0,\mathbf{g}} e^{i\mathbf{K}_{\mathbf{g}}^+ \cdot \mathbf{r}} \quad (5.27)$$

situando el plano  $z = 0$  sobre la primera superficie de discontinuidad. Esta elección nos conduce al sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_C^+ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}_1^I & \tilde{Q}_1^{II} \\ \tilde{Q}_1^{III} & \tilde{Q}_1^{IV} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{E}_C^- \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

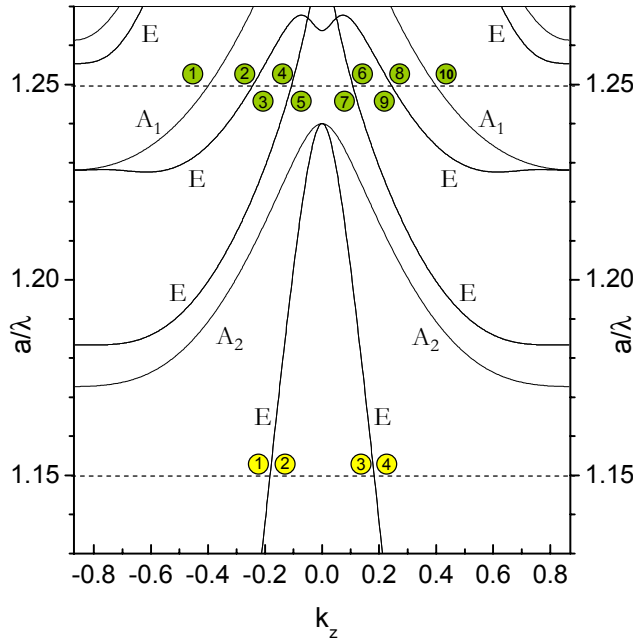
$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_{trans} \\ \mathbf{E}_C^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}_2^I & \tilde{Q}_2^{II} \\ \tilde{Q}_2^{III} & \tilde{Q}_2^{IV} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_C^+ \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

del que, a no mucho tardar, extraeremos el valor de  $\mathbf{E}_C$  que buscamos:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_C^+ \\ \mathbf{E}_C^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{Q}_2^{III} \end{pmatrix} [\mathbb{1} - \tilde{Q}_1^{II} \tilde{Q}_2^{III}]^{-1} \tilde{Q}_1^I \mathbf{E}_0 \quad (5.30)$$

<sup>27</sup>Puesto que la magnitud de los campos se fija arbitrariamente.

<sup>28</sup>Cfr. [Ochiai01]



**Figura 5.12** : Detalle de la relación de dispersión de un ópalo desnudo en la dirección (111). Nótese que el valor máximo de  $|k_z|$  es  $\sqrt{3}/2$  en unidades de  $2\pi/a$ . Las líneas discontinuas indican las frecuencias para las que se han calculado las “branching ratios” de las diversas bandas, etiquetadas con un número creciente de izquierda a derecha. Con el objeto de hacer más clara la discusión, también se incluye la representación irreducible asociada a cada banda. (Reelaboración de la Fig. 5 en [López-Tejeira02])

Ya estamos listos para enfrentarnos con la incidencia normal sobre la cara  $\{111\}$  de un ópalo desnudo: de acuerdo con el procedimiento descrito, empleamos una estructura compuesta por 32 planos de esferas para obtener  $\mathbf{E}_C$  entre los planos  $16^\circ$  y  $17^\circ$ , suponiendo que en esa zona la distribución del campo es análoga a la del cristal infinito. La relación de dispersión de este último se vuelve a mostrar en la Fig. 5.12, acompañada una vez más de la asignación de representaciones. Consideremos los valores de la energía indicados por líneas discontinuas: para el primero de ellos ( $a/\lambda = 1.15$ ) no se predice la existencia de autoestados inaccesibles, mientras que para el segundo ( $a/\lambda = 1.25$ ) éstos conviven con otros que no lo son. Pero tal y como puede apreciarse en la Tabla 5.4, el “peso” de los autoestados  $A_1$  en el campo del interior de la muestra es completamente despreciable, lo cual confirma de forma fehaciente su carácter de “inaccesibles”, por más que en este caso particular eso no tenga ninguna consecuencia observable.

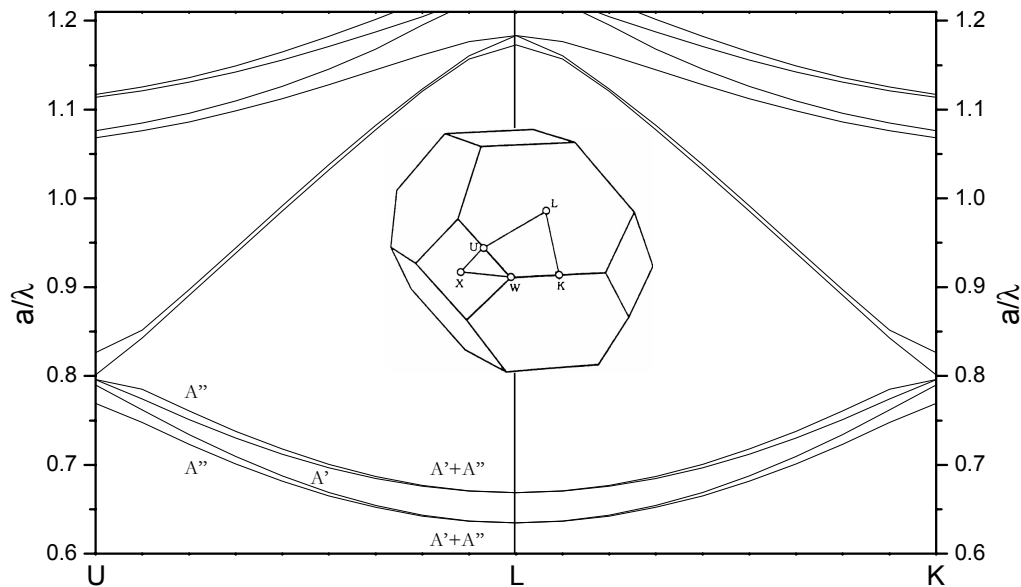
**Tabla 5.4** : Valores de las “branching ratios” correspondientes a las distintas bandas de la Fig. 5.12, calculados para las frecuencias 1.15 y 1.25 en unidades reducidas de  $a/\lambda$ . La representación irreducible de cada banda aparece indicada entre corchetes. Nótese que en ambos casos  $\sum_{\alpha} b_{\alpha} \gtrsim 1$  debido a la acumulación de errores numéricos.

$a/\lambda = 1.15$	$a/\lambda = 1.25$	
$b_1[E]=0.689$	$b_1[A_1] < 10^{-16}$	$b_6[E]=0.085$
$b_2[E]=0.348$	$b_2[E]=0.265$	$b_7[E]=0.016$
$b_3[E]=0.007$	$b_3[E]=0.377$	$b_8[E]=0.098$
$b_4[E]=0.006$	$b_4[E]=0.109$	$b_9[E]=0.054$
	$b_5[E]=0.035$	$b_{10}[A_1] < 10^{-16}$

Afortunadamente, esta conclusión en apariencia pesimista sobre el papel de la simetría de las bandas en la respuesta óptica de los ópalos artificiales se vio pronto desmentida por una revisión más concienzuda de nuestro propio trabajo... aunque esa es otra historia que debe ser contada en otro apartado.

### Efectos de la simetría en la respuesta espectral (I)

La principal conclusión del apartado anterior es que la presencia de bandas inaccesibles por razones de simetría no tiene ningún efecto observable en la respuesta óptica de los ópalos cuando la luz incide normalmente sobre su superficie natural de crecimiento. Pero ¿qué ocurre cuando la incidencia deja de ser normal? Desde el punto de vista de la Primera Zona de Brillouin, eso supondría un desplazamiento desde el punto  $L$  hacia los bordes de la cara hexagonal del poliedro. Sin embargo, el bajo contraste de índices entre los componentes del sistema provoca que, para un ángulo de incidencia lo suficientemente bajo, todas las posibles direcciones resulten equivalentes, según puede apreciarse en la estructura de bandas que se presenta en la Fig. 5.13. Así que podemos olvidarnos una vez más de la dependencia con el ángulo acimutal y considerar que la incidencia ocurre siempre en la misma dirección, por ejemplo aquella en la que el extremo del vector  $\mathbf{k}$  está contenido el segmento  $\overline{LU}$ .



**Figura 5.13 :** Estructura de bandas fotónicas de un ópalo artificial en las proximidades del punto  $L$ . Puede apreciarse la equivalencia de las direcciones  $\overline{LK}$  a los efectos de la respuesta óptica del sistema. Con el objeto de hacer más clara la discusión sobre su accesibilidad, se incluyen las representaciones irreducibles correspondientes a las cuatro primeras bandas del segmento  $\overline{LU}$ .

De acuerdo con el Teorema de Construcción de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  que se introdujo en el Capítulo 4, el “pequeño co-grupo” correspondiente a dicho segmento es el conocido como  $C_s$ . Dado que la única operación distinta de la identidad que contiene ese grupo es una reflexión, podemos utilizarla para clasificar sus representaciones irreducibles, distinguiendo entre las “simétricas” ( $\chi(\{\hat{\sigma}|\mathbf{0}\}) = 1$ ) y “antisimétricas” ( $\chi(\{\hat{\sigma}|\mathbf{0}\}) = -1$ ), a las que asignaremos, respectivamente, las etiquetas  $A'$  y  $A''$ .

A la vista de la Fig. 5.13, constatamos la presencia de ambos tipos de bandas en las proximidades del primer pseudogap en  $L$ , pero ¿qué podemos decir sobre las propiedades de simetría del campo incidente? Un ejemplo concreto nos ayudará a comprender mejor esta cuestión:

Consideremos el caso en el que la dirección de incidencia viene dada por  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a}(\frac{3}{4}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8})$ , un vector tan representativo del segmento  $\overline{LU}$  como cualquier otro. Nada nos impide entonces expresar  $\mathbf{E}_{inc}$  mediante una combinación lineal de dos vectores base contenidos dentro del plano normal a la dirección de incidencia, como por ejemplo

$$\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \alpha \left[ \frac{1}{\sqrt{5}}, -\frac{2}{\sqrt{5}}, 0 \right] e^{i\frac{2kx}{\sqrt{6}} + \frac{ky}{\sqrt{6}} + \frac{kz}{\sqrt{6}}} + \beta \left[ \frac{2}{\sqrt{30}}, \frac{1}{\sqrt{30}}, -\frac{5}{\sqrt{30}} \right] e^{i\frac{2kx}{\sqrt{6}} + \frac{ky}{\sqrt{6}} + \frac{kz}{\sqrt{6}}} \quad (5.31)$$

No es difícil entender que el carácter “simétrico”, “antisimétrico” o indiferente de este campo depende de los valores de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , pero lo más interesante del caso es la posibilidad de “sintonizar” *a priori* el acoplo con los distintos tipos de bandas, permitiendo la interacción sólo con las de tipo  $A'$ , sólo con las de tipo  $A''$  o bien con ambas. Y para averiguar las condiciones en las que se verifica cada uno de estos supuestos no tenemos más que resolver la ecuación

$$\{\hat{\sigma}|\mathbf{0}\}\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \pm \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) \quad (5.32)$$

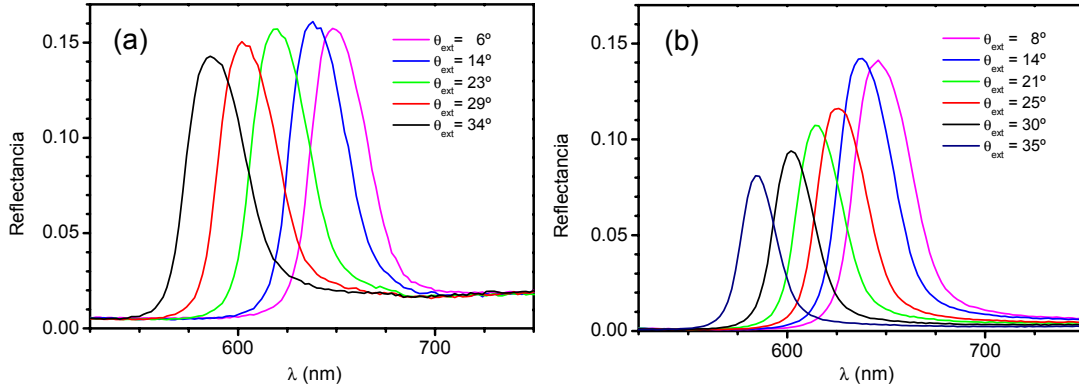
donde el signo positivo o negativo se corresponde con los dos posibles comportamientos bajo la reflexión. Así,

$$\alpha = \frac{3\beta}{\sqrt{6}} \Rightarrow \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{A'} = \beta \left[ \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right] e^{i\frac{2kx}{\sqrt{6}} + \frac{ky}{\sqrt{6}} + \frac{kz}{\sqrt{6}}} \quad (5.33)$$

$$\alpha = -\frac{2\beta}{\sqrt{6}} \Rightarrow \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{A''} = \beta \left[ 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right] e^{i\frac{2kx}{\sqrt{6}} + \frac{ky}{\sqrt{6}} + \frac{kz}{\sqrt{6}}} \quad (5.34)$$

Pero si recordamos cuáles son los vectores de propagación y normal a la superficie en el ejemplo que nos ocupa, descubriremos que estas definiciones de los campos coinciden exactamente con las de las polarizaciones  $p$  y  $s$ , ya que en el primer caso  $\mathbf{E}_{inc}$  se encuentra





**Figura 5.14** : Medidas experimentales de la reflectancia especular de un ópalo desnudo en función del ángulo de incidencia para **(a)** luz con polarización *s* y **(b)** luz con polarización *p*. (Reelaboración de la Fig. 3 en [Galisteo-López03])

contenido en el **plano de incidencia** mientras que en el segundo es perpendicular a él:

$$\mathbf{E}_{A'} = \beta(-3\hat{\mathbf{n}} + 2\sqrt{2}\hat{\mathbf{k}})e^{i\frac{2k_x}{\sqrt{6}} + \frac{k_y}{\sqrt{6}} + \frac{k_z}{\sqrt{6}}} \quad (5.35)$$

$$\mathbf{E}_{A''} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{k}}) = 0 \quad (5.36)$$

Consecuentemente, podemos valernos de la polarización para establecer qué tipo de bandas no van a ser accesibles a la luz incidente. ¿Cuáles son, entonces, las implicaciones prácticas de este hallazgo?

Tal y como se mostraba en la Fig. 5.13, las bandas  $A'$  y  $A''$  coinciden en el punto  $L$  para luego irse separando conforme el vector de onda se desliza por el segmento  $\overline{LU}$ . Y dado que la distancia entre las bandas en el punto  $L$  se corresponde con la anchura del primer pico Bragg, debería observarse una diferencia creciente entre los valores de tal anchura para cada polarización conforme se fuera aumentando el ángulo de incidencia.

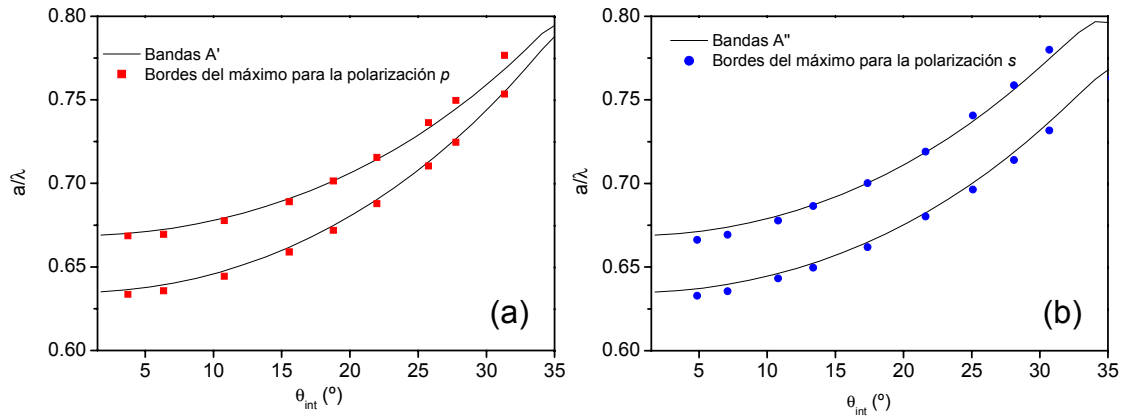
Aunque un efecto similar ya se había predicho con anterioridad<sup>29</sup> para la cara  $\{100\}$  del mismo tipo de red cristalina, no existía ningún tipo de confirmación experimental de semejante fenómeno, por lo que el siguiente paso era, en buena lógica, intentar medir dichas anchuras. Con ese propósito en mente, nuestros colaboradores del ICMM llevaron a cabo un experimento tan simple como medir la reflectancia especular de un ópalo para ambos tipos de polarización, empleando una muestra compuesta por esferas de 0.3 micras de diámetro.<sup>30</sup> Si bien ya en los espectros experimentales de la Fig. 5.14 puede apreciarse una clara diferencia en la anchura de los picos que aumenta en paralelo al

<sup>29</sup>Cfr. [Ohtaka96]

<sup>30</sup>Remitimos a [Galisteo-López03] al lector interesado en los detalles del experimento.

ángulo de incidencia, necesitamos establecer la correspondencia entre ángulos internos y externos antes de poder compararlos directamente con la estructura de bandas. Y es en este punto donde podemos volver a recuperar la Ley de Bragg, una vez disipada cualquier duda sobre su aplicación en el caso que nos ocupa:

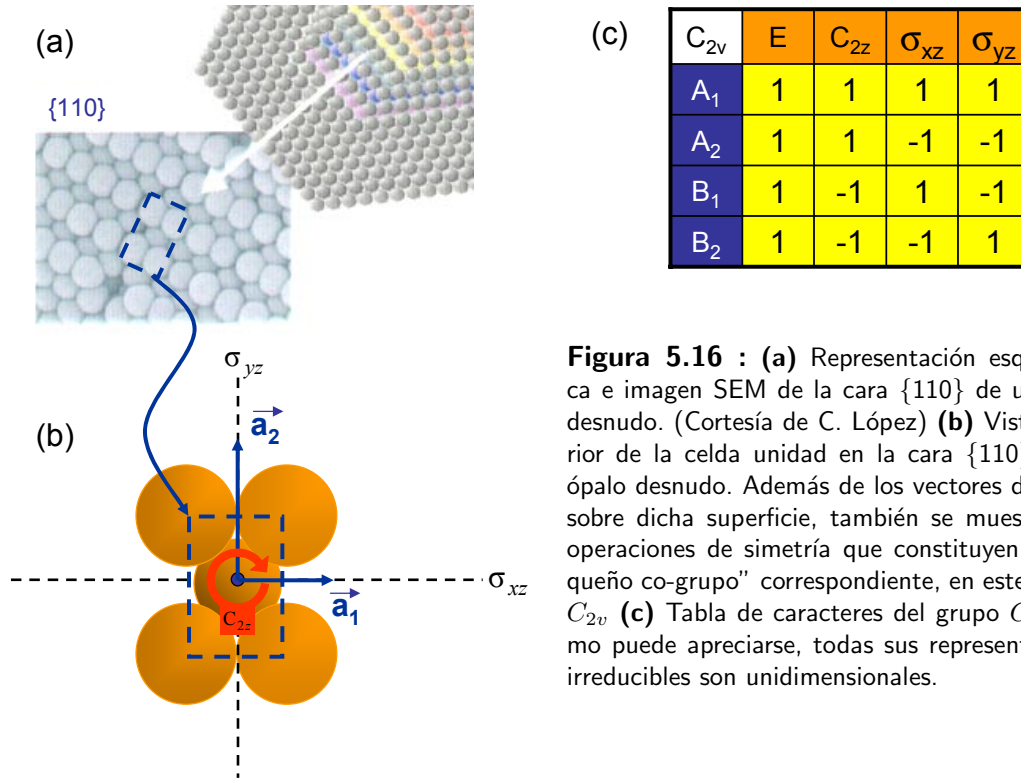
La Fig. 5.15 muestra la posición de los bordes del pico de reflectancia para distintos ángulos de incidencia, calculados a partir de los valores  $n_{eff} = 1.336$  y  $d_{111} = 244 \text{ nm}$  proporcionados por la Ley de Bragg siguiendo el criterio usual de “la anchura de la mitad de la máxima altura”. Según puede apreciarse, la coincidencia entre las bandas  $A'$  y  $A''$  y los valores correspondientes a las polarizaciones  $p$  y  $s$  es de lo más satisfactoria, lo cual confirma la validez de nuestro análisis a la par que proporciona la primera evidencia experimental del papel de la simetría en la respuesta óptica de los ópalo desnudos, algo que quizás había pasado desapercibido por una razón tan simple como que la luz sin polarizar puede acceder a ambos tipos de bandas y el pseudogap más ancho contiene en su interior al más estrecho.



**Figura 5.15 :** Estructura de bandas (líneas continuas) y anchura de los máximos de reflectancia experimentales (símbolos) de un ópalo desnudo a lo largo de la dirección  $LU$ , en función del ángulo interno. **(a)** Bandas  $A'$  frente a medidas con polarización  $p$  **(b)** Bandas  $A''$  frente a medidas con polarización  $s$ . (Reelaboración de la Fig. 3 en [Galisteo-López03])

### Efectos de la simetría en la respuesta espectral (II)

Aunque la verificación de nuestro análisis sobre la influencia de la polarización constituye por sí sola un buen argumento a favor de tener en cuenta toda la información contenida en la estructura de la bandas a la hora de entender las propiedades ópticas de los ópalo artificiales, la ausencia de fenómenos observables en el caso de incidencia normal sobre la cara  $\{111\}$  no deja de resultar insatisfactoria, sobre todo si tenemos en cuenta que ésa es la configuración más accesible desde el punto de vista experimental.



**Figura 5.16 :** (a) Representación esquemática e imagen SEM de la cara {110} de un ópalo desnudo. (Cortesía de C. López) (b) Vista superior de la celda unidad en la cara {110} de un ópalo desnudo. Además de los vectores de la red sobre dicha superficie, también se muestran las operaciones de simetría que constituyen el “pequeño co-grupo” correspondiente, en este caso el  $C_{2v}$  (c) Tabla de caracteres del grupo  $C_{2v}$ . Como puede apreciarse, todas sus representaciones irreducibles son unidimensionales.

Sin embargo, recientes trabajos<sup>31</sup> apuntan hacia la posibilidad de conseguir muestras opalinas con orientación (001) ó (110), por lo que bien vale la pena volver a plantearnos el análisis de la compatibilidad entre representaciones en esas nuevas circunstancias:

El caso de la dirección (001) ya fue analizado en uno de los primeros estudios sobre el tema<sup>32</sup> y es por entero análogo al de la (111): la única representación irreducible del “pequeño co-grupo”<sup>33</sup> que es compatible con el campo incidente es la doblemente degenerada, una vez más con la etiqueta E. Y de nuevo la simple inspección de la Fig. 5.10 basta para hacernos descartar la presencia de efectos significativos.

La dirección (110) comporta, por su parte, la interesante peculiaridad de que, tal y como puede apreciarse en la tabla de caracteres de la Fig. 5.16c, ninguna de las representaciones irreducibles de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}^{\parallel} = \mathbf{0})$  está intrínsecamente degenerada. Esta situación nos obligará a efectuar un análisis de compatibilidad más detallado.

<sup>31</sup>Véase [Fenollosa03]

<sup>32</sup>Cfr. [Karathanos98]

<sup>33</sup>Ahora el  $C_{4v}$

Si la dirección normal a la superficie de discontinuidad del sistema viene dada por el vector  $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)$ , el campo incidente puede expresarse como una combinación lineal de los vectores

$$\left\{ \mathbf{v}_1 = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}}; \mathbf{v}_2 = [0, 0, -1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \right\} \quad (5.37)$$

Aplicemos, pues, a  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$  las operaciones puntuales de  $C_{2v}$  para determinar qué representación de dicho grupo es compatible con ellos:

$$\{\hat{C}_{2z}|\mathbf{0}\} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.38)$$

$$\{\hat{\sigma}_{xz}|\mathbf{0}\} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.39)$$

$$\{\hat{\sigma}_{yz}|\mathbf{0}\} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = \left[ -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.40)$$

$$\{\hat{C}_{2z}|\mathbf{0}\} [0, 0, -1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = [0, 0, 1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.41)$$

$$\{\hat{\sigma}_{xz}|\mathbf{0}\} [0, 0, -1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = [0, 0, 1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.42)$$

$$\{\hat{\sigma}_{yz}|\mathbf{0}\} [0, 0, -1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} = [0, 0, -1] e^{i \frac{kx}{\sqrt{2}} + \frac{ky}{\sqrt{2}}} \quad (5.43)$$

Según se deduce de (5.38)-(5.43), las trazas de las matrices de transformación son, respectivamente,

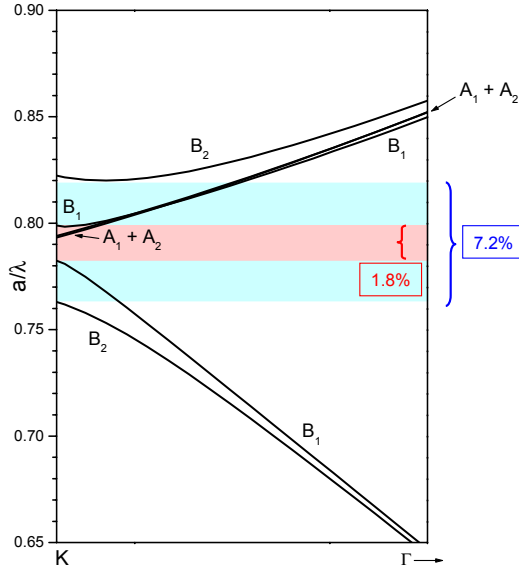
$$\chi(\{\hat{C}_{2z}|\mathbf{0}\}) = -2; \quad \chi(\{\hat{\sigma}_{xz}|\mathbf{0}\}) = 0; \quad \chi(\{\hat{\sigma}_{yz}|\mathbf{0}\}) = 0 \quad (5.44)$$

por lo que, a la vista de la tabla de la Fig. 5.16c, podemos concluir que en esta ocasión la representación del campo incidente **sí es reducible**. Haciendo uso de la fórmula de reducción que se incluye en el Apéndice B, no tardaremos mucho en determinar que la representación asociada a  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$  es, finalmente, la suma directa de las denotadas con las letras  $B_1$  y  $B_2$ :

$$\Gamma_{110} = B_1 \oplus B_2 \quad (5.45)$$

Es posible afirmar, por tanto, que sólo las bandas con esas etiquetas resultarán accesibles para un campo que incida normalmente sobre la superficie del sistema. Veamos cuáles son las implicaciones desde el punto de vista de la respuesta espectral.

Si las bandas  $A_1$  y  $A_2$  resultan inaccesibles para la luz incidente, cabría esperar un máximo de reflectancia en el intervalo de energías en el que no hay ningún estado del tipo  $B_1$  o  $B_2$ , es decir  $[0.785, 0.8] \frac{a}{\lambda}$  a la vista de la estructura de bandas que se muestra



**Figura 5.17 :** Estructura de bandas fotónicas a lo largo de la dirección  $\overline{\Gamma K}$  en la zona más próxima al borde de la 1ª ZB, calculada para una estructura de ópalo desnudo. Las etiquetas se corresponden con las representaciones irreducibles del grupo  $C_{2v}$ . Para mayor claridad se ha recurrido al símbolo de la suma (+) cuando dos bandas no degeneradas se encuentran demasiado próximas como para distinguirlas a simple vista en la escala de la figura. Las franjas de color rosa y azul indican, respectivamente, la separación mínima entre las bandas  $B_1$  y  $B_2$  contiguas, de la que también se señala la anchura relativa.

en la Fig. 5.17. Sin embargo, la información más interesante que puede obtenerse de esa figura tiene que ver con la configuración “compuesta” que adoptan las cuatro primeras bandas con etiquetas  $B_1$  y  $B_2$ , idéntica a la de las  $A'$  y  $A''$  en el caso del segmento  $\overline{LU}$  ¿Sería posible acceder también aquí a la anchura del pseudogap externo?

Como nada nos impide hacer coincidir la orientación de  $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$  con la de los vectores de red indicados en la Fig. 5.16b, imaginemos por un momento que el campo incidente adoptara la forma

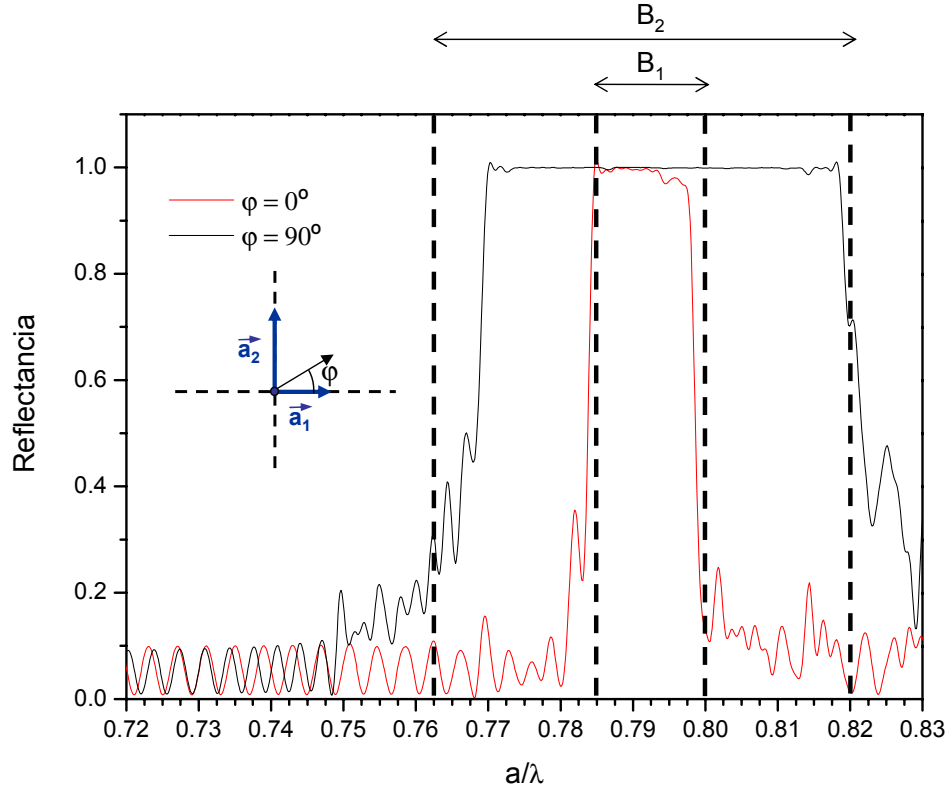
$$\mathbf{E}_{inc} = \alpha \mathbf{a}_2 = \alpha \mathbf{v}_2 \quad (5.46)$$

En tal caso, las ecuaciones (5.41)-(5.43) nos conducirían a

$$\chi(\{\hat{C}_{2z}|\mathbf{0}\}) = -1; \quad \chi(\{\hat{\sigma}_{xz}|\mathbf{0}\}) = -1; \quad \chi(\{\hat{\sigma}_{yz}|\mathbf{0}\}) = +1 \quad (5.47)$$

que son precisamente los caracteres definitorios de la representación  $B_2$ , de acuerdo con la tabla de la Fig. 5.16c. Consecuentemente, cuando se produzca un alineamiento entre el campo y el lado más largo de la celda unidad, la anchura del primer pseudogap debería crecer hasta ocupar la totalidad del intervalo  $[0.763, 0.82] \frac{a}{\lambda}$  al resultarle inaccesibles las bandas  $B_1$  que determinan la anchura en el resto de circunstancias.

Así pues, el análisis de la simetría de las bandas nos permite predecir un efecto observable en el caso de incidencia normal sobre la cara  $\{110\}$  de los ópalos desnudos, pero ahora asociado al ángulo acimutal que, a los efectos de acceder a uno u otro pseudogap, vendría a desempeñar aquí el mismo papel que la polarización en el apartado anterior.



**Figura 5.18** : Espectro de reflectancia en incidencia normal sobre la cara  $\{110\}$  de un ópalo desnudo, calculado mediante el método TMM para  $N = 256$ . Las líneas verticales discontinuas indican la separación entre bandas contiguas con idéntica representación irreducible. Puede apreciarse que la anchura del pico de reflectancia aumenta de forma significativa cuando el campo incidente se alinea con el vector  $\mathbf{a}_2$  debido a que los autoestados del tipo  $B_1$  dejan de ser accesibles.

Lamentablemente, la verificación experimental de este efecto<sup>34</sup> aún no ha podido ser llevada a la práctica, a causa de la dificultad de obtener una muestra con orientación (110) de un tamaño suficiente. De momento tendremos que conformarnos con presentar un espectro de reflectancia teórico, calculado mediante el método TMM<sup>35</sup> para una muestra compuesta por 256 capas de esferas. Según puede apreciarse en la Fig. 5.18 la diferencia de anchuras entre los picos en uno y otro caso es claramente apreciable y se encuentra en buen acuerdo con la estructura de bandas, por lo que no nos cabe duda de que esta predicción se verá confirmada por medidas ópticas en un futuro muy próximo.

<sup>34</sup>Que consistiría en ir girando la muestra hasta observar un brusco ensanchamiento del pico.

<sup>35</sup>Dado que la pequeña distancia entre planos  $\{110\}$  consecutivos descarta por completo el método layer-KKR. De hecho, ha sido necesario recurrir a un **filtrado FFT** del espectro para soslayar los problemas de convergencia numérica siempre presentes en los límites de nuestra capacidad de computación.

### 5.3. Conclusiones

En este capítulo hemos expuesto el conjunto de nuestra investigación sobre las propiedades fotónicas de los ópalos desnudos, dividida en tres partes bien diferenciadas cuyas principales conclusiones podrían, respectivamente, resumirse así:

- Es posible aprovechar el efecto de la sinterización para caracterizar de forma precisa las muestras destinadas a la fabricación de estructuras inversas.
- El estudio sistemático de la dependencia angular en la respuesta espectral de los ópalos desnudos demuestra que un modelo analítico tan sencillo como la Ley de Bragg puede aplicarse con garantías a la caracterización estructural de estos sistemas, circunstancia que respalda su uso como vínculo de conexión entre las propiedades ópticas de los ópalos reales y las de las estructuras periódicas perfectas que los modelizan.
- La caracterización de las representaciones irreducibles asociadas a cada uno de los autoestados del campo electromagnético en un ópalo desnudo permite identificar las bandas que resultan inaccesibles para la luz incidente a causa de la incompatibilidad entre sus respectivas propiedades de simetría. Esta circunstancia, verificada de forma cuantitativa por medio de un cálculo numérico independiente, también hace posible la predicción de efectos observables en la respuesta óptica de los ópalos. Algunos de estos efectos ya han sido confirmados experimentalmente, poniendo así de manifiesto la importancia de tener en cuenta toda la información contenida en los cálculos de estructura de bandas a la hora de intentar entender la compleja interacción entre la luz y los cristales fotónicos.

NOTA: Este capítulo está basado en las referencias [Reynolds99], [López-Tejeira02] y [Galisteo-López03].

### Referencias

- [Blanco01] A. Blanco, H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejeira y J. Sánchez-Dehesa. *Photonic band gap properties of CdS-in-opal systems*. Applied Physics Letters **78** (21), 3181–3183, mayo 2001.
- [Born99] M. Born y E. Wolf. *Principles of Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 7<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1999.

- [Busch98] K. Busch y S. John. *Photonic band gap formation in certain self-organizing systems*. Physical Review E **58** (3), 3896–3908, septiembre 1998.
- [Datta93] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho y C. M. Soukoulis. *Effective dielectric constant of periodic composite structures*. Physical Review B **48** (20), 14936–14943, noviembre 1993.
- [Fenollosa03] R. Fenollosa, M. Ibisate, S. Rubio, C. López, F. Meseguer y J. Sánchez-Dehesa. *Photonic crystal microprisms obtained by carving artificial opals*. Journal of Applied Physics **93** (1), 671–674, enero 2003.
- [Galisteo-López03] J. F. Galisteo-López, F. López-Tejeira, S. Rubio, C. López y J. Sánchez-Dehesa. *Experimental evidence of polarization dependence in the optical response of opal-based photonic crystals*. Applied Physics Letters **82** (23), 4068–4070, junio 2003.
- [Karathanos98] V. Karathanos. *Inactive frequency bands in photonic crystals*. Journal of Modern Optics **45** (8), 1751–1758, agosto 1998.
- [Lamb80] W. Lamb, D. M. Wood y N. W. Ashcroft. *Long-wavelength electromagnetic propagation in heterogeneous media*. Physical Review B **21** (6), 2248–2266, marzo 1980.
- [López-Tejeira02] F. López-Tejeira, T. Ochiai, K. Sakoda y J. Sánchez-Dehesa. *Symmetry characterization of eigenstates in opal-based photonic crystals*. Physical Review B **65**, 195110/1–8, abril 2002.
- [Míguez97] H. Míguez, C. López, F. Meseguer, A. Blanco, L. Vázquez, R. Mayoral, M. Ocaña, V. Fornés y A. Mifsud. *Photonic crystal properties of packed submicrometric  $\text{SiO}_2$  spheres*. Applied Physics Letters **71** (9), 1148–1150, septiembre 1997.
- [Míguez98] H. Míguez, F. Meseguer, C. López, A. Blanco, J. S. Moya, J. Requena, A. Mifsud y V. Fornés. *Control of the photonic crystal properties of fcc packed submicrometric  $\text{SiO}_2$  spheres by sintering*. Advanced Materials **10** (6), 480–482, abril 1998.



- [Míguez99] H. Míguez, A. Blanco, C. López, F. Meseguer, H. Yates, M. Pemble, F. López-Tejiera, F. García-Vidal y J. Sánchez-Dehesa. *Face centered cubic photonic bangap materials based on opal-semiconductor composites*. Journal of Lightwave Technology **17** (11), 1975–1981, noviembre 1999.
- [Moroz99] A. Moroz y C. Sommers. *Photonic band gaps of three-dimensional face-centred cubic lattices*. Journal of Physics: Condensed Matter **11** (4), 997–1008, febrero 1999.
- [Ochiai01] T. Ochiai y J. Sánchez-Dehesa. *Superprism effect in opal-based photonic crystals*. Physical Review B **64**, 245113/1–7, diciembre 2001.
- [Ohtaka96] K. Ohtaka y Y. Tanabe. *Photonic band using vector spherical waves. III. Group-theoretical treatment*. Journal of the Physical Society of Japan **65** (8), 2670–2684, agosto 1996.
- [Reitz86] J. R. Reitz, F. J. Milford y R. W. Christy. *Fundamentos de la Teoría Electromagnética*. Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1986.
- [Reynolds99] A. Reynolds, F. López-Tejiera, D. Cassagne, F. García-Vidal, C. Jouanin y J. Sánchez-Dehesa. *Spectral properties of opal-based photonic crystals having a SiO<sub>2</sub> matrix*. Physical Review B **60** (16), 11422–11426, octubre 1999.
- [Romanov01] S. G. Romanov, T. Maka, C. M. Sotomayor-Torres, M. Müller, R. Zentel, D. Cassagne, J. Manzanares-Martínez y C. Jouanin. *Diffractión of light from thin-film polymethylmethacrylate opaline photonic crystals*. Physical Review E **63**, 056603/1–5, abril 2001.
- [Taylor66] E. F. Taylor y J. A. Wheeler. *Spacetime Physics*. W. H. Freeman, San Francisco, 1<sup>a</sup> ed<sup>ón</sup>., 1966.
- [Thijssen99] M. S. Thijssen, R. Sprik, J. E. G. J. Wijnhoven, M. Megens, T. Narayanan, A. Lagendijk y W. L. Vos. *Inhibited light propagation and broadband reflection in photonic air-sphere crystals*. Physical Review Letters **83** (14), 2730–2733, octubre 1999.

- [vanDriel00] H. M. van Driel y W. L. Vos. *Multiple Bragg wave coupling in photonic band-gap crystals*. Physical Review B **62** (15), 9872–9875, octubre 2000.
- [Velikov02] K. P. Velikov, T. van Dillen, A. Polman y A. van Blaaderen. *Photonic crystals of shape-anisotropic colloidal particles*. Applied Physics Letters **81** (5), 838–840, julio 2002.
- [Vos96] W. L. Vos, R. Sprik, A. van Bladeren, A. Imhof, A. Lagendijk y G. H. Wegdam. *Strong effects of photonic band structures on the diffraction of colloidal crystals*. Physical Review B **53** (24), 16231–16235, junio 1996.

# CAPÍTULO 6

---

## Presentación de resultados (II)

---

*Nunca odié a un hombre lo suficiente como para devolverle sus diamantes.*

Zsa Zsa Gabor

En este capítulo se reúnen resultados referidos a varios sistemas con una característica común: se obtienen más o menos directamente a partir de nanoesferas de  $\text{SiO}_2$ .

### Contenido

---

<b>6.1. Ópalos inversos de CdS: modelos de crecimiento</b>	<b>143</b>
<b>6.2. Estructuras con la simetría de una red diamante</b>	<b>148</b>
6.2.1. Fabricación directa de una red diamante de esferas dieléctricas	148
Una idea loca...	148
...que al final se hizo realidad	152
6.2.2. Auto-ensamblaje orientado de esferas a partir de cadenas (110)	154
<b>6.3. Conclusiones</b>	<b>160</b>
<b>Referencias</b>	<b>161</b>

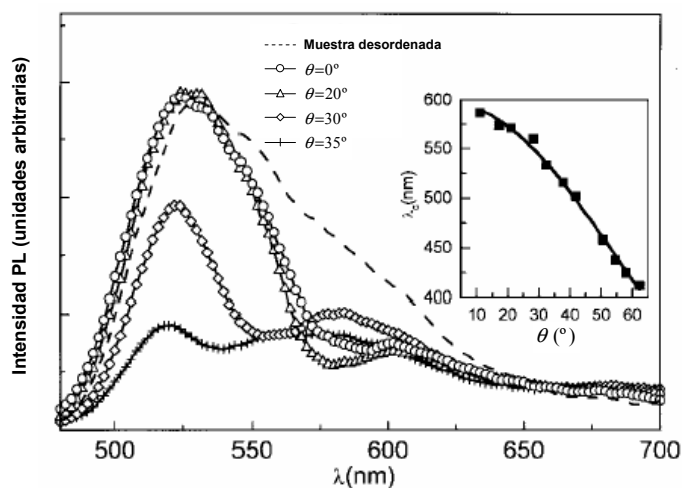
---



## 6.1. Ópalos inversos de CdS: modelos de crecimiento

Desde la primera propuesta de E. Yablonovitch sobre la inhibición de la emisión espontánea, la idea de combinar las propiedades asociadas a las bandas fotónicas y electrónicas dentro de un mismo dispositivo ha inspirado un gran número de trabajos de todo tipo, tanto teóricos como de carácter experimental. Por lo que a los ópalos se refiere, esta inquietud se ha encaminado mayoritariamente hacia la introducción de alguna clase de **medio activo**<sup>1</sup> en el interior de un ópalo desnudo diseñado de tal modo que su intervalo de frecuencias prohibidas en la dirección (111) coincida con el rango de emisión del otro material, habitualmente un **colorante orgánico**<sup>2</sup> o un semiconductor del grupo II–VI. Fijemos nuestra atención en esta última posibilidad, y aún más concretamente, en el caso en el que el compuesto elegido sea el CdS:

Aunque las medidas ópticas llevadas a cabo por diversos autores<sup>3</sup> demuestran de forma inequívoca la modificación que el pseudogap (111) produce en el **espectro de fotoluminiscencia** del CdS depositado dentro de la matriz opalina, qué duda cabe de que la configuración más deseable sería aquella en la que el propio cristal fotónico fuese también el medio activo, es decir, un ópalo inverso como los descritos en el Capítulo 2. Y dado que la condición previa para poder lograr tal objetivo es conseguir llenar con CdS todo el volumen no ocupado por las esferas, la correcta caracterización de la cantidad de semiconductor presente en la estructura se convierte de nuevo en una parte fundamental del proceso de síntesis.



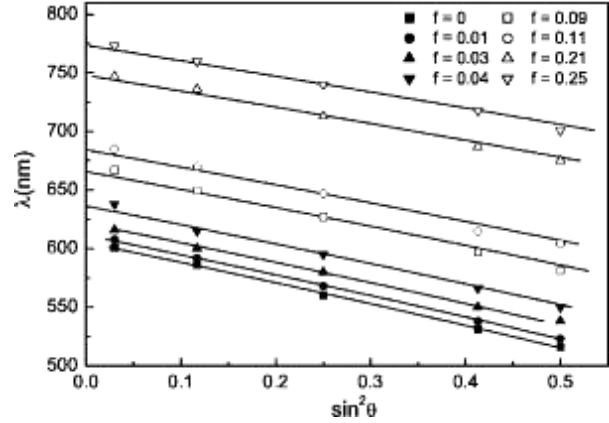
**Figura 6.1** : Evolución del espectro de fotoluminiscencia de un ópalo infiltrado con CdS, medido sobre la cara {111} de la muestra para distintos ángulos de inclinación respecto al detector. La reproducción a escala reducida de la dependencia angular del primer pico Bragg en la parte derecha permite apreciar cómo el desplazamiento en el mínimo de la intensidad de emisión discurre en paralelo al del primer pseudogap en  $L$ . (Reelaboración de la Fig. 10 en [Míguez99])

<sup>1</sup>En el sentido óptico del término.

<sup>2</sup>Cfr. [Eradat01], [Eradat02] o [Koenderink02] como ejemplos recientes.

<sup>3</sup>De las que la Fig. 6.1 constituye un buen ejemplo, sin que eso suponga ningún juicio de valor respecto de las incluidas en trabajos tales como [Vlasov97a], [Vlasov97b], [Blanco98] o [Lin02].

**Figura 6.2 :** Dependencia angular del primer máximo de reflectancia sobre la cara {111} de un ópalo compuesto por esferas de 275 nm de diámetro en distintos momentos del proceso de infiltración con CdS. El ajuste mediante la Ley de Bragg (líneas continuas) de los valores experimentales (símbolos) permite estimar la cantidad de semiconductor presente dentro de la muestra. (Reproducción de la Fig. 1 en [Blanco01])



Según puede imaginar el lector, el procedimiento escogido para tal fin consiste (una vez más) en el estudio del desplazamiento de la posición del primer máximo de reflectancia en la dirección (111). Suponiendo que éste siguiera la Ley de Bragg, bastaría con aproximar el índice de refracción efectivo del sistema completo por un promedio de los de sus componentes para estimar la cantidad de CdS en cada momento del proceso, ya que el parámetro  $d_{111}$  podría determinarse con anterioridad a la infiltración del semiconductor. La Fig. 6.2 muestra ese tipo de estimación para un ópalo desnudo de 275 nm de diámetro progresivamente infiltrado con CdS mediante inmersiones sucesivas en dos soluciones precursoras.<sup>4</sup> Tal y como se aprecia en la figura, el desplazamiento en la posición del pico nos indica que la fracción de volumen ocupada por el semiconductor alcanza un valor en torno al 25 % del total, lo que supondría un 96 % del espacio libre entre las esferas en una estructura fcc compacta. Nada nos dice, sin embargo, este ajuste sobre los detalles microscópicos del crecimiento del semiconductor.

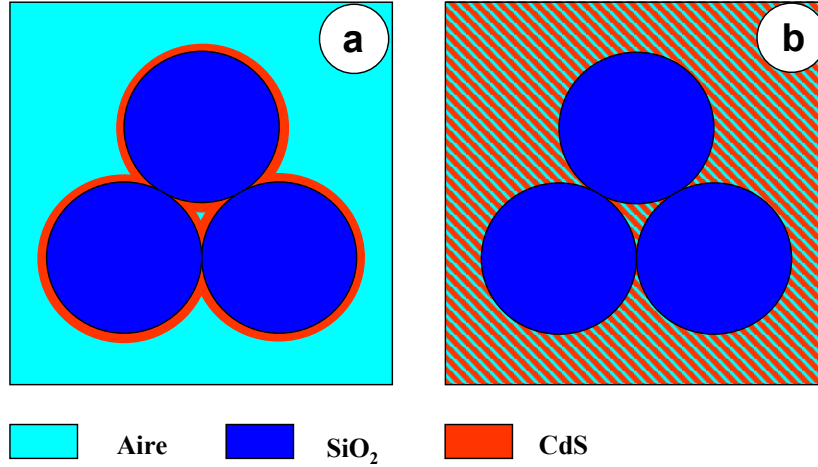
Con vistas a una mejor comprensión de dicho proceso, parece oportuno considerar (al menos) los dos modelos que se presentan en la Fig. 6.3. En el primero de ellos se postula que el CdS forma capas concéntricas sobre las esferas de SiO<sub>2</sub>, mientras que en el segundo el hueco entre éstas se considera ocupado por un **medio efectivo** cuya función dieléctrica  $\varepsilon_h$  viene dada por

$$\varepsilon_h \approx \frac{f_{CdS}}{0.26}(\varepsilon_{CdS} - 1.0) + 1.0 \quad (6.1)$$

Si bien el análisis microscópico<sup>5</sup> de las primeras etapas de crecimiento del CdS parece apoyar el modelo de capas, no es menos cierto que tal asunción resulta cada vez más

<sup>4</sup>Véase [Blanco98] para más detalles.

<sup>5</sup>Cfr. [Torrecillas00]

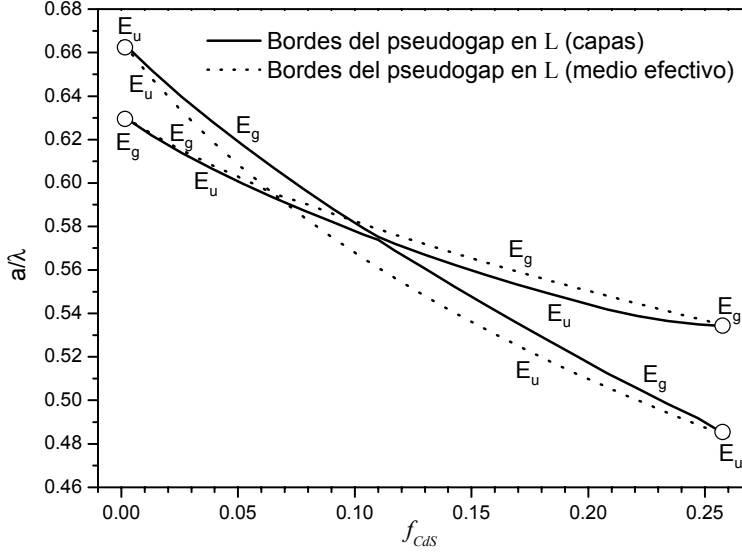


**Figura 6.3 :** Representación esquemática de dos posibles modelos para el crecimiento de CdS dentro del ópalo. (a) Formación de capas concéntricas en torno a las esferas de SiO<sub>2</sub> (b) Medio efectivo en todo el volumen accesible.

dudosa conforme se aumenta la fracción de volumen ocupada por el semiconductor. Así pues, intentaremos utilizar la anchura del primer pico de reflectancia en incidencia normal sobre la cara {111} de la muestra para dilucidar qué modelo proporciona los mejores resultados, identificando tal anchura con la del pseudogap en el punto  $L$ .

Bajo la hipótesis del medio efectivo, todo el material se convertiría en ópticamente homogéneo para el valor de  $f_{CdS}$  en el que  $\varepsilon_h = \varepsilon_{SiO_2}$ , el 6 % de acuerdo a la ecuación (6.1). Por contra, en el modelo de capas, ambos materiales conservarían unos bordes bien definidos a lo largo de todo el proceso, de modo que la consideración del conjunto como un medio homogéneo resultaría *a priori* más discutible. En cualquier caso, tal condición de homogeneidad debería ir asociada a la completa desaparición del pseudogap en  $L$  para una cierta fracción de llenado. Y dado que la resolución numérica de las ecuaciones de Maxwell nos obliga a ser muy prudentes a ese respecto, deberemos recurrir una vez más a la Teoría de Representaciones:

Como ya se señaló en el capítulo precedente, el grupo puntual  $D_{3d}$  constituye el “pequeño co-grupo” asociado al punto  $L$ . Aunque ninguna de sus representaciones irreducibles tiene una degeneración intrínsecamente cuádruple, nada impide la degeneración accidental de las bandas  $E_g$  y  $E_u$  que definen los bordes del pseudogap, por lo que bastaría con comprobar si la posición relativa de ambos tipos de bandas se modifica a lo largo del proceso de crecimiento del CdS para establecer la existencia de un punto en el que el sistema puede considerarse ópticamente homogéneo.



**Figura 6.4 :** Anchura del pseudogap en el punto  $L$  como función de la cantidad de CdS en el sistema. Las líneas continuas y de puntos indican los resultados del modelo de capas y del de medio efectivo, respectivamente. Las etiquetas hacen referencia a las representaciones irreducibles del grupo  $D_{3d}$ . Adviértase cómo el cambio de su posición relativa nos permite asegurar el cierre del pseudogap en ambos casos.

En la Fig. 6.4 se muestra la evolución de la anchura en cada uno de los modelos, asumiendo un valor de 5.75 para la función dieléctrica del semiconductor.<sup>6</sup> Aunque a simple vista resulte difícil decidir si el gap llega a cerrarse por completo para algún valor de  $f_{CdS}$ , el intercambio en las posiciones de las bandas  $E_g$  y  $E_u$  nos garantiza que tal circunstancia se verifica en ambos casos, contradiciendo nuestra primera intuición sobre el modelo de capas. Y si bien esa misma figura también pone de manifiesto la lógica equivalencia entre los dos mecanismos en los extremos del intervalo y el buen acuerdo obtenido con la estimación del punto de corte para el modelo de medio efectivo, no podemos dejar de destacar una clara diferencia cualitativa desde el punto de vista de las propiedades de simetría: la presencia de cualquier recubrimiento esférico (por mínimo que éste sea) provoca un cambio en la posición relativa de las representaciones que no desaparece hasta que el CdS ocupa la totalidad del espacio entre las esferas, es decir

$$R_{\text{pseudogap}} = \begin{cases} E_{g(u)} & f_{CdS} = 0 \\ E_{u(g)} & f_{CdS} \in (0, 1 - \pi/3\sqrt{2}) \\ E_{g(u)} & f_{CdS} = 1 - \pi/3\sqrt{2} \end{cases} \quad (6.2)$$

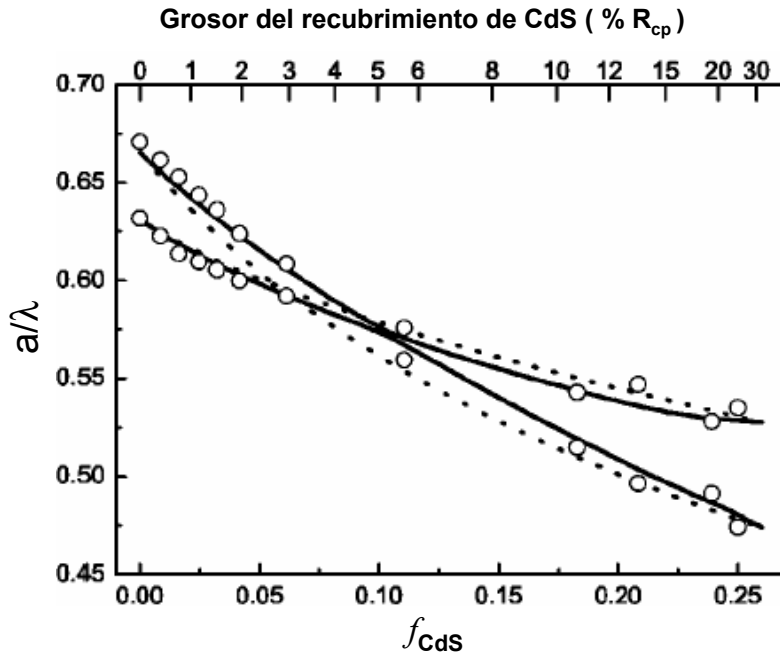
Por desgracia, tal diferencia no puede aprovecharse en esta ocasión, pues ambas representaciones se reducen de idéntica forma en los segmentos adyacentes,<sup>7</sup> lo cual convierte a la anchura del espectro de reflectancia en el único modo de determinar el modelo correcto a partir de las medidas sobre la cara  $\{111\}$  de la muestra.

<sup>6</sup>Resultante de promediar los valores del índice de refracción en el intervalo entre los 400 y 800 nm.

<sup>7</sup>Remitimos una vez más a las relaciones de compatibilidad recogidas en el Apéndice B



Según puede apreciarse en la Fig. 6.5, las anchuras experimentales<sup>8</sup> parecen respaldar el modelo de capas en las primeras etapas de crecimiento del semiconductor, al menos hasta valores de  $f_{CdS}$  próximos al 6 %. Semejante comportamiento no resulta en absoluto sorprendente, pues el único lugar en el que puede depositarse el material en las fases más tempranas del proceso es la superficie de las esferas o bien la de otras nanopartículas apenas crecidas sobre ellas. Menos aún debe extrañarnos la ausencia de puntos experimentales en el rango de valores inmediatamente superior, dada la extraordinaria dificultad de resolver las características del espectro en un medio prácticamente homogéneo. Y cuando los valores vuelven a ser accesibles, nos encontramos conque el comportamiento del sistema ya no se ajusta tan claramente al modelo de capas, pero tampoco al de medio efectivo, aunque podamos aventurar que se halle ya más cerca de este último a causa de la formación de poros dentro del CdS.



**Figura 6.5 :** Bordes de los máximos de reflectancia experimental (círculos) en incidencia normal, superpuestos sobre las predicciones teóricas para los modelos de capas (líneas continuas) y medio efectivo (líneas de puntos) ya presentadas en la Fig. 6.4. Los valores de  $f_{CdS}$  se han estimado a partir de la Ley de Bragg. (Reelaboración de la Fig. 2 en [Blanco01])

Podemos resumir, pues, el contenido de la presente sección afirmando que la combinación de las técnicas numéricas con el análisis de las propiedades de simetría de los autoestados nos ha permitido analizar con detalle la infiltración de CdS en los ópalos a partir de una propiedad tan genérica como su espectro de reflectancia, obteniéndose predicciones cuantitativas que se encuentran en buen acuerdo con los resultados experimentales, si bien aún no ha sido posible determinar de forma inequívoca el mecanismo dominante en todas las etapas del proceso.

<sup>8</sup>Medidas según el criterio habitual de la mitad de la altura del máximo.

## 6.2. Estructuras con la simetría de una red diamante

Ya desde los inicios del estudio de los cristales fotónicos, diversos trabajos<sup>9</sup> han venido señalando a la red diamante como la más favorable para la aparición de gaps completos en sistemas tridimensionales. Además, este tipo de simetría presenta la ventaja adicional de que el intervalo de energías prohibidas se localiza entre la segunda y la tercera banda, por lo que debería ser mucho menos sensible a la presencia de defectos que el de, por ejemplo, una estructura de ópalo inverso.

¿Por qué no existe entonces ningún cristal fotónico con dicha simetría pese a resultar tan ventajosa? La respuesta a esa pregunta es doblemente frustrante: desde el punto de vista de la minimización de la energía libre de sus componentes, la complejidad de la estructura no la hace favorable energéticamente, pero, por otro lado, esa misma complejidad supera las posibilidades de las actuales técnicas de microfabricación.<sup>10</sup> Parecería, pues, que la red diamante es del todo inaccesible a efectos prácticos.

Afortunadamente, tal perspectiva resulta (una vez más) demasiado pesimista, ya que todas las dificultades descritas pueden esquivarse al menos de dos formas distintas, según se expondrá a lo largo de la presente sección. Este descubrimiento nos abrirá definitivamente las puertas a la tan deseada red diamante.

### 6.2.1. Fabricación directa de una red diamante de esferas dieléctricas

#### Una idea loca...

De acuerdo con las referencias ya mencionadas, la configuración óptima para la aparición de un gap completo consiste en una red diamante de esferas de aire en el interior de un material dieléctrico con alto índice de refracción. ¿Cómo podríamos obtenerla?

En primer lugar, parece bastante sensato asumir la hipótesis de que el proceso de inversión de un sistema semejante debería ser muy similar al de un ópalo artificial. Consecuentemente, el problema quedaría “reducido” a obtener una estructura directa de esferas de SiO<sub>2</sub> dispuestas en la forma adecuada. Puesto que los argumentos termodinámicos descartan toda posibilidad de auto-ensamblado de las esferas individuales en una red diamante, estaríamos obligados a colocarlas una por una en la posición correcta, una opción factible a día de hoy gracias a la manipulación mediante micro-robots ya mencionada en el Capítulo 2. Pero incluso adoptando tan expeditivo procedimiento, la

---

<sup>9</sup>Cfr. [Ho90] y [Chan95]

<sup>10</sup>Adviértase a este respecto que ni siquiera la famosa **yablonovita** es una red diamante en sentido estricto, según se señalaba ya en [Yablonovitch91].

baja fracción de volumen<sup>11</sup> asociada a una red diamante en la que las esferas se tocaran sin interpenetrarse también haría imposible su construcción “epitaxial” a causa de la inestabilidad de las posiciones de contacto entre capas contiguas.<sup>12</sup> Deberemos recurrir, por tanto, a un procedimiento indirecto.

Al igual que es posible imaginar la estructura diamante como la suma de dos redes fcc idénticas desplazadas por un vector  $\frac{1}{4}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$ , nada nos impide dar la vuelta al argumento y combinar dos redes diamante bajo la misma prescripción. No es difícil demostrar que el sistema resultante es una red bcc.<sup>13</sup> Y aunque no sea una elección demasiado habitual, siempre podemos expresar las posiciones de dicha red en una forma en la que se haga explícito el “tortuoso” proceso de su construcción, es decir, como una estructura fcc con una base de cuatro elementos

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 + \mathbf{d}_i \quad (6.3)$$

$$\left\{ \mathbf{d}_1 = \mathbf{0}; \mathbf{d}_2 = \frac{1}{4}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3); \mathbf{d}_3 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3); \mathbf{d}_4 = \frac{3}{4}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) \right\} \quad (6.4)$$

$$\left\{ \mathbf{a}_1 = \frac{a^*}{2}(1, 1, 0); \mathbf{a}_2 = \frac{a^*}{2}(1, 0, 1); \mathbf{a}_3 = \frac{a^*}{2}(0, 1, 1) \right\} \quad (6.5)$$

en la que el valor del parámetro  $a^*$  debe ajustarse a  $4\phi/\sqrt{3}$  para recuperar el factor de llenado de una red bcc<sup>14</sup> con contacto entre las esferas, siendo  $\phi$  el diámetro de éstas.

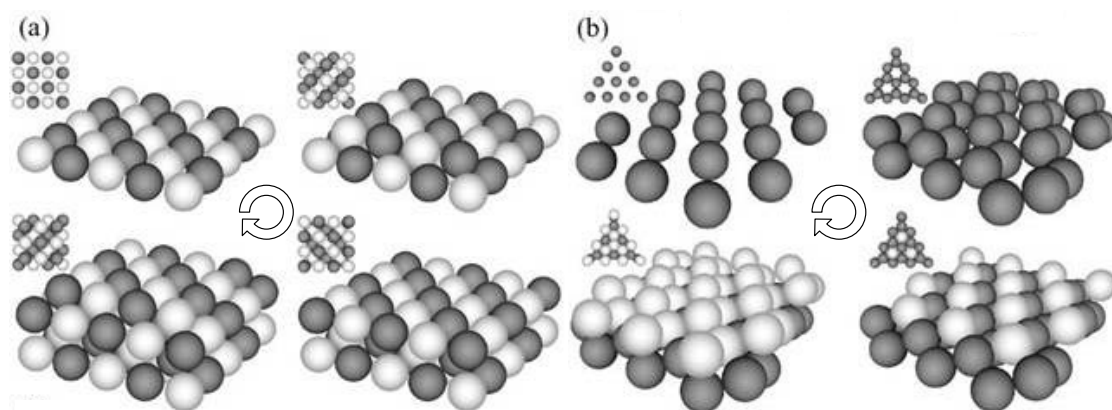
¿Cuál el propósito último de tal planteamiento? A la vista de lo expuesto, resulta evidente que el conjunto de las esferas asociadas a los vectores  $\mathbf{d}_1$  y  $\mathbf{d}_2$  constituye de por sí una red diamante, al igual que lo hace por su parte el de las asociadas a  $\mathbf{d}_3$  y  $\mathbf{d}_4$ . Imaginemos ahora que elegimos dos tipos diferentes de esferas del mismo tamaño para constituir la estructura, asociando cada uno de ellos a una de las dos redes subyacentes. El sistema resultante, al que podemos denominar **red bcc mixta** o mbcc, sería una red bcc desde el punto de vista de las posiciones de sus componentes pero no así desde el de las propiedades físicas. Y si esas distintas propiedades físicas permitieran a su vez la eliminación selectiva de uno solo de los dos tipos de esferas, habríamos conseguido finalmente nuestro objetivo de construir una red diamante de esferas dieléctricas, primer paso hacia la consecución del tan esquivo gap completo entre las primeras bandas.

<sup>11</sup>  $f = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$ , menos de la mitad de la de las estructuras fcc y hcp compactas.

<sup>12</sup> A menos que se dispusiera de un “pegamento” para las esferas como el que se mencionará al final del apartado.

<sup>13</sup> A modo de curiosidad, diremos que, según se relata en [London38], esta idea ya se había manejado muy anteriormente en un contexto bien distinto.

<sup>14</sup> Que es precisamente  $f = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0.68$ , o sea el doble de la de la diamante.



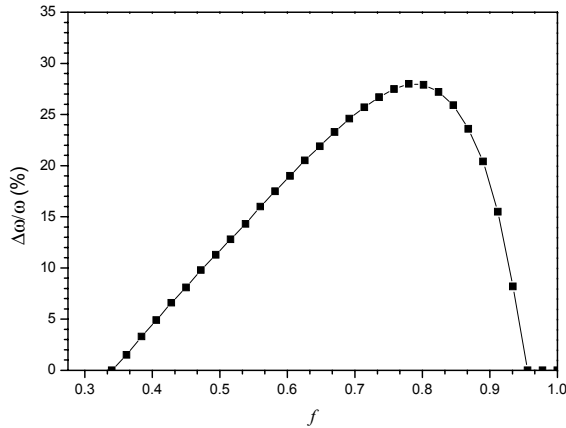
**Figura 6.6 :** Representación esquemática de las distintas etapas en el proceso de crecimiento de la estructura mbcc a lo largo de las direcciones (001) (a) y (111) (b), ordenadas según el sentido de las agujas del reloj. La escala de grises permite identificar a las esferas comprendidas dentro de cada subred. Para mayor claridad, también se incluye a tamaño reducido la vista superior de la muestra en cada momento del proceso. (Reelaboración de la Fig. 1 en [García-Santamaría01])

Según puede apreciarse en la Fig. 6.6, la distribución de los dos tipos de material en los planos normales a las direcciones (001) y (111) de una red mbcc sí permite la construcción “epitaxial” porque las esferas siempre ocupan posiciones de equilibrio energético sobre las del plano anterior, a causa del mayor factor de llenado de dicha estructura. Bastaría entonces con fijar la primera capa mediante un sustrato en el que se predeterminasen las posiciones de adsorción de las esferas para poder construir una estructura tan grande... como la paciencia del operador del micro-robot.<sup>15</sup>

Una vez construida la estructura mbcc, el siguiente paso es la eliminación de la mitad de sus elementos sin modificar la posición de los restantes. Y puesto que una de las dos sub-redes va a estar compuesta por las inevitables esferas de  $\text{SiO}_2$ , la opción más cómoda pasa porque las restantes sean de látex, un material orgánico que puede obtenerse comercialmente en forma de esferas monodispersas dentro de un amplio rango de tamaños y que, además, posee unas propiedades químicas lo suficientemente distintas del  $\text{SiO}_2$  como para permitir un ataque selectivo.

Supongamos que ya hemos sido capaces de conseguir una red diamante de esferas de  $\text{SiO}_2$  con  $f \approx 0.34$  y estamos listos para iniciar el proceso de infiltración con silicio que nos permitirá obtener posteriormente la estructura inversa. Si echamos un vistazo a la Fig. 6.7 antes de embarcarnos en tal procedimiento, no tardaremos en darnos cuenta de que la anchura del gap completo para esa fracción de volumen es completamente irrisoria, por lo que resultaría necesario, una vez más, incrementar la fracción de volumen

<sup>15</sup>Remitimos a las referencias [Miyazaki00] y [Saito02] al lector interesado en los detalles más técnicos del procedimiento de manipulación de partículas micrométricas.

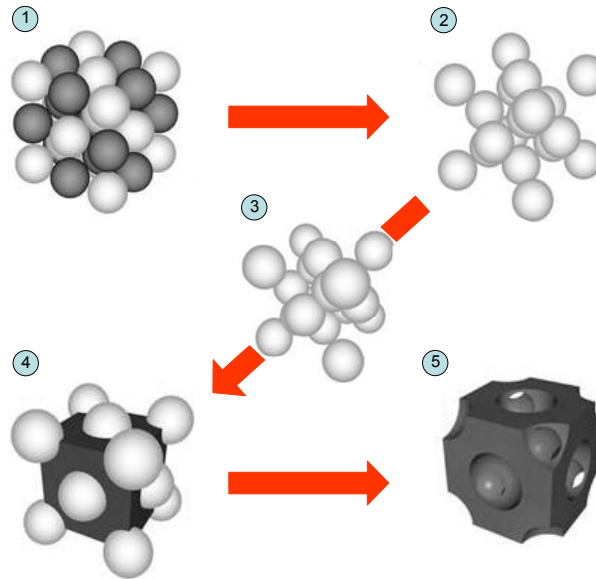


**Figura 6.7 :** Anchura relativa del gap completo para distintos valores del factor de llenado en una red diamante de esferas de aire en silicio ( $\varepsilon = 12.0$ ). Como puede apreciarse,  $\Delta\omega/\omega$  crece de forma paralela a  $f$  hasta alcanzar un máximo en torno a  $f = 0.78$  para luego caer bruscamente a su valor inicial.

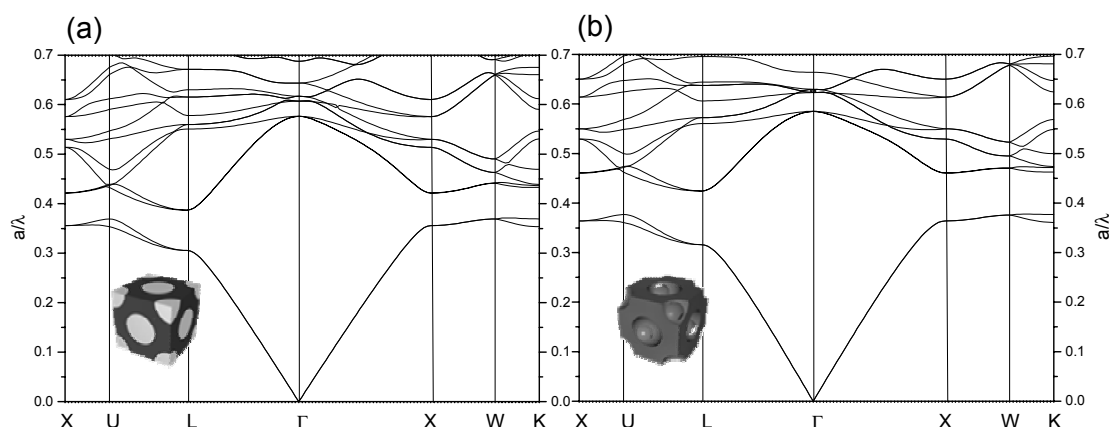
que ocupan las esferas.<sup>16</sup> Y aunque los mejores resultados se obtendrían para valores próximos al 78 %, bien podríamos conformarnos con un más modesto 50 % que nos garantizase una anchura del gap cercana al 12 %.

Así pues, ya no resta más que infiltrar e invertir para completar la última etapa del laborioso proceso que se resume esquemáticamente en la Fig. 6.8: ensamblaje de la red mbcc, eliminación de las esferas de látex, incremento del factor de llenado, infiltración con Si y (5) ataque químico para obtener la estructura inversa.

**Figura 6.8 :** Representación esquemática de las distintas etapas en la fabricación de una red diamante con gap fotónico completo: (1) ensamblaje de la red mbcc con esferas de  $\text{SiO}_2$  y látex, (2) eliminación de las esferas de látex, (3) incremento del factor de llenado, (4) infiltración con Si y (5) ataque químico para obtener la estructura inversa. (Reelaboración de la Fig. 2 en [García-Santamaría01])



<sup>16</sup>Una discusión detallada de cómo llevar a cabo tal incremento puede encontrarse en [García-Santamaría03]



**Figura 6.9 :** (a) Estructura de bandas fotónicas correspondiente a una red diamante de esferas de  $\text{SiO}_2$  en Si. (b) Ídem después de eliminar el  $\text{SiO}_2$  en el sistema anterior. En ambos casos, el Si supone un 50 % de volumen total. Para mayor claridad también se incluye una representación esquemática de cada tipo de material. (Reelaboración de la Fig. 3 en [García-Santamaría01])

Finalmente, y a modo de cierre de la propuesta, la Fig. 6.9 presenta las estructuras de bandas asociadas a las etapas (4) y (5) del proceso de fabricación. Puede apreciarse cómo el gap completo, mucho más pronunciado en el caso de la red silicio/aire, se localiza entre la segunda y la tercera banda en el punto  $\Gamma$ , lo cual garantiza su robustez frente a eventuales defectos en el sistema.

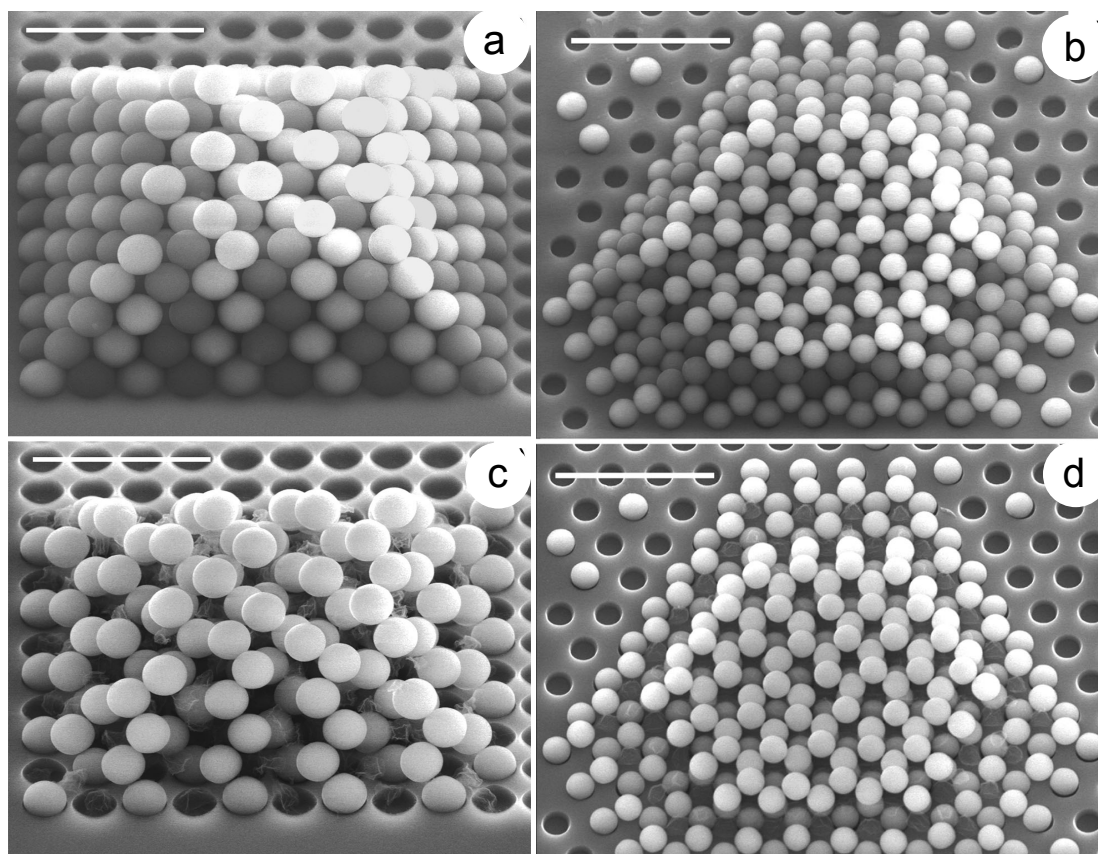
### ...que al final se hizo realidad

Aunque nuestra colaboración directa en este trabajo se limitó a la propuesta teórica presentada ante la comunidad científica en un artículo aparecido en octubre de 2001,<sup>17</sup> no nos resistimos a referir brevemente<sup>18</sup> los pasos que ya se han dado hacia su completa demostración experimental, fruto de un ímprobo esfuerzo por parte de los equipos del ICMM y el National Institute for Materials Science de Tsukuba (Japón):

En agosto de 2002 se publicaba en las páginas de la revista *Advanced Materials* el trabajo del que se ha extraído la Fig. 6.10. En ella se presentan las imágenes SEM de una estructura mbcc de seis capas construida con esferas de  $\text{SiO}_2$  y látex a lo largo de las direcciones (001) (a) y (111) (b) de la red sobre un sustrato de silicio. En (c) y (d) puede apreciarse cómo, después de efectuado un **ataque con plasma de oxígeno**, esas mismas estructuras se han transformado ya en las primeras redes diamante de esferas en la escala nanométrica de las que hay constancia en la literatura. Más aún, en ese mismo

<sup>17</sup>Cfr. [García-Santamaría01]

<sup>18</sup>Para más detalles, consúltense [García-Santamaría02a], [García-Santamaría02b] y [García-Santamaría03].



**Figura 6.10 :** (a) Estructura mbcc de seis capas construida a lo largo de la dirección (001) con 165 esferas de látex y 177 de  $\text{SiO}_2$ , todas de  $1.18\mu\text{m}$  de diámetro. (b) Ídem para la dirección (111), ahora con esferas de  $0.9\mu\text{m}$  de diámetro (133 de látex y 274 de  $\text{SiO}_2$ ). En (c) y (d) se vuelven a mostrar las mismas estructuras, convertidas ya en redes diamante después de eliminarse el látex mediante un ataque con plasma de oxígeno. Todas las imágenes están giradas hacia el lector para hacer más visibles las caras laterales de las muestras. Como guía para el ojo, también se incluyen barras de escala de  $5\mu\text{m}$  de longitud. (Reelaboración de las Figs. 2 y 3 en [García-Santamaría02b])

trabajo también se demostraba la viabilidad de construir directamente una red diamante con orientación (001) recurriendo a la contaminación inducida por el propio haz del SEM sobre la muestra, que hace las veces de “pegamento” para las esferas. Así pues, es posible afirmar que los pasos (1) y (2) en el esquema de la Fig. 6.8 ya se han completado de forma satisfactoria, con independencia de lo prohibitivo de su coste. Pero, ¿qué podemos decir de los siguientes?

En lo tocante al aumento de la fracción de volumen de la estructura, la situación a día de hoy dista mucho de ser satisfactoria, pues el procedimiento usual de sinterización debe descartarse a causa de la precaria estabilidad mecánica de la estructura. Aunque se

han propuesto<sup>19</sup> varias soluciones ingeniosas basadas en un incremento del radio de las esferas posterior al proceso de ensamblaje, aún no se dispone de ninguna muestra con un factor de llenado siquiera próximo al 50 %. Tampoco el proceso de inversión se hallaría libre de ciertos inconvenientes, ya que el acceso del disolvente a las esferas de  $\text{SiO}_2$  se vería estorbado por la “costra” de Si depositada sobre las superficies de discontinuidad del sistema, sin que su reducido tamaño permitiera recurrir al habitual “cleavage” de los ópalos artificiales. Y ya por último, no podemos olvidar que, como ya se señalaba en el Capítulo 2, obtener la respuesta óptica de un sistema de tan reducidas dimensiones tampoco ha resultado factible hasta el momento presente, aunque quizá sea esta la faceta en la que quepa esperar progresos más rápidos.<sup>20</sup>

Concluiremos, por tanto, este apartado con la idea de que el progreso de la ciencia de materiales y el trabajo en común de un equipo multidisciplinar de físicos, químicos e ingenieros ha permitido un avance significativo hacia la geometría diamante, resolviendo algunos de los problemas que más habían dificultado su consecución. Es de esperar que en un próximo futuro estos logros, de carácter aún fundamental, den lugar a un amplio abanico de aplicaciones en diversos campos de la nanotecnología.

### 6.2.2. Auto-ensamblaje orientado de esferas a partir de cadenas (110)

Aunque la eficacia del procedimiento descrito en el apartado anterior haya podido confirmarse experimentalmente, no podemos pasar por alto la muy escasa eficiencia que pone de manifiesto esa misma confirmación: según se recoge en [García-Santamaría03], resultan necesarias no menos de diez horas de trabajo para conseguir una estructura diamante con cuatro capas y alrededor de 300 esferas. Si además tenemos en cuenta que ese número de capas constituye únicamente una sexta parte de las necesarias<sup>21</sup> para garantizar una reflectancia cercana al 100 % en el interior del gap, no es difícil concluir que la manipulación individual de las esferas no constituye la estrategia más propicia para la producción a gran escala. Y puesto que el auto-ensamblaje espontáneo de las esferas tampoco resulta factible, merece la pena explorar las posibilidades que nos ofrece la vía intermedia introducida en el Capítulo 2: el auto-ensamblaje orientado.

Según se describió en el apartado anterior, el punto de partida para la construcción directa de una red diamante consistía en elaborar un sustrato que facilitara la correcta colocación de las esferas. ¿Sería acaso posible diseñar un procedimiento que orientara su sedimentación hacia la simetría deseada?

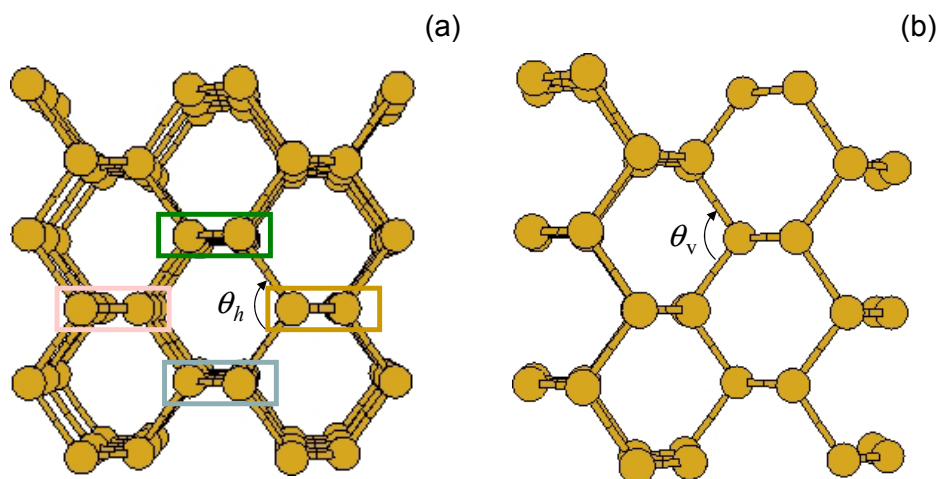
---

<sup>19</sup>Véase [García-Santamaría03]

<sup>20</sup>A la vista de, por ejemplo, [Míguez02].

<sup>21</sup>Cfr. Fig. 2.7a



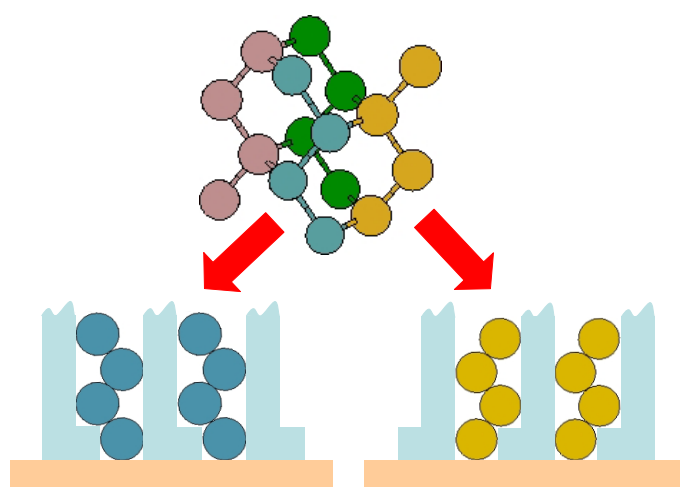


**Figura 6.11 :** Vistas superior **(a)** y lateral **(b)** de una red diamante con sus superficies de discontinuidad orientadas a lo largo de la dirección (110). El contacto puntual entre las esferas se ha sustituido por un “enlace” cilíndrico para una mejor visualización de la estructura. Los ángulos  $\theta_h$  y  $\theta_v$  definen, respectivamente, la posición relativa de cada terna de esferas contiguas sobre los planos paralelos o perpendiculares a las superficies de discontinuidad. La clave de colores pretende facilitar la comprensión de la figura inmediatamente posterior.

Consideremos una estructura diamante de esferas finita con sus superficies de discontinuidad orientadas en la dirección (110), adoptando por un momento uno de los populares modelos de esferas y cilindros para captar mejor sus propiedades geométricas. En la Fig 6.11a se presenta una vista superior de tal estructura, en la que se ha destacado el ángulo que forman los “enlaces” situados en los planos paralelos a las superficies de discontinuidad. Por su parte, los “enlaces” contenidos en los planos normales pueden apreciarse en la parte (b). En ambos casos el valor del ángulo es  $\theta = \arccos -1/3 \approx 109.47^\circ$ , aunque mantendremos la distinción entre ángulos “verticales” y “horizontales” por razones que quedarán claras más adelante.

Con vistas a reinterpretar la red diamante en una base adaptada a esta particular orientación, vamos a fijarnos con más detalle en la Fig.6.11a, recurriendo a un código de colores para, después de haber eliminado las restantes, distinguir las esferas que definen el hexágono central. Según puede apreciarse en la Fig. 6.12, toda la estructura puede entenderse entonces como la suma de cuatro “cadenas” de dos tipos diferentes que se van alternando en los planos paralelos a la superficie del papel, de modo que si fuéramos capaces de producir a gran escala dichas cadenas de esferas,<sup>22</sup> sería relativamente sencillo ensamblarlas para construir la red diamante que estamos buscando. Esta es la idea clave de la que vamos a intentar valernos para nuestros propósitos.

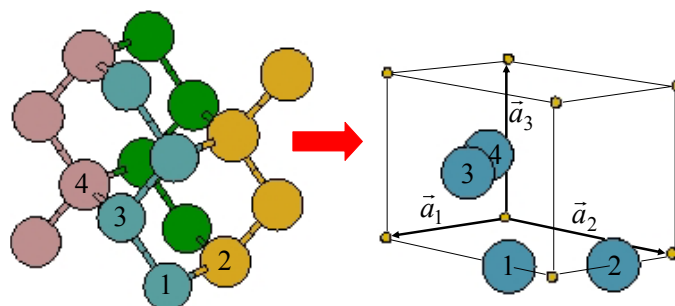
<sup>22</sup>Cuya única diferencia es, por otra parte, un giro de  $180^\circ$  respecto al eje (110)



**Figura 6.12 :** Representación esquemática de la red diamante como combinación de dos tipos de “cadenas” a lo largo de la dirección  $(110)$ . En la parte inferior se presenta el modo de obtener las cadenas individuales mediante el confinamiento de las esferas entre pilares verticales dispuestos periódicamente.

En la parte inferior de la Fig. 6.12 se muestra una forma sorprendentemente sencilla de construir dichas cadenas: bastaría con confinar las esferas entre unos pilares de otro material terminados en una suerte de escalón que nos permitiese elegir el tipo de cadena deseado, para luego alternarlo con el otro hasta recuperar la estructura completa. Resulta, pues, conveniente que culminemos nuestro propósito de describir la red por medio de una base alternativa para poder determinar las dimensiones y la correcta colocación de dichos pilares:

A la vista de la Fig. 6.13, no es difícil darse cuenta de la posible redefinición de la estructura diamante como una red prismática con una base compuesta por los cuatro “átomos” numerados en la parte izquierda. Así, bajo la suposición de contacto puntual



**Figura 6.13 :** Representación esquemática de la red diamante como combinación de dos tipos de “cadenas” a lo largo de la dirección  $(110)$ . Las esferas numeradas constituyen la base necesaria para recuperar la estructura completa a partir de los vectores de red en la parte derecha de la figura.

entre esferas contiguas y tomando el eje  $z$  como normal a los planos (110), la red vendría descrita por

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 + \mathbf{d}_i \quad (6.6)$$

$$\left\{ \mathbf{d}_1 = \mathbf{a}_1 + y_1 \mathbf{a}_2; \mathbf{d}_2 = \frac{1}{2} \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2; \mathbf{d}_3 = \mathbf{a}_1 + \frac{1}{2} (\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3); \mathbf{d}_4 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + y_4 \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3) \right\} \quad (6.7)$$

$$\left\{ \mathbf{a}_1 = 2\phi \sin \frac{\theta_h}{2} (1, 0, 0); \mathbf{a}_2 = 2\phi \left( \cos \frac{\theta_h}{2} + \cos \frac{\theta_v}{2} \right) (0, 1, 0); \mathbf{a}_3 = 2\phi \sin \frac{\theta_v}{2} (0, 0, 1) \right\} \quad (6.8)$$

donde  $\phi$  vuelve a ser el diámetro de las esferas y los parámetros auxiliares  $y_1, y_4$  sirven para aligerar las ecuaciones:

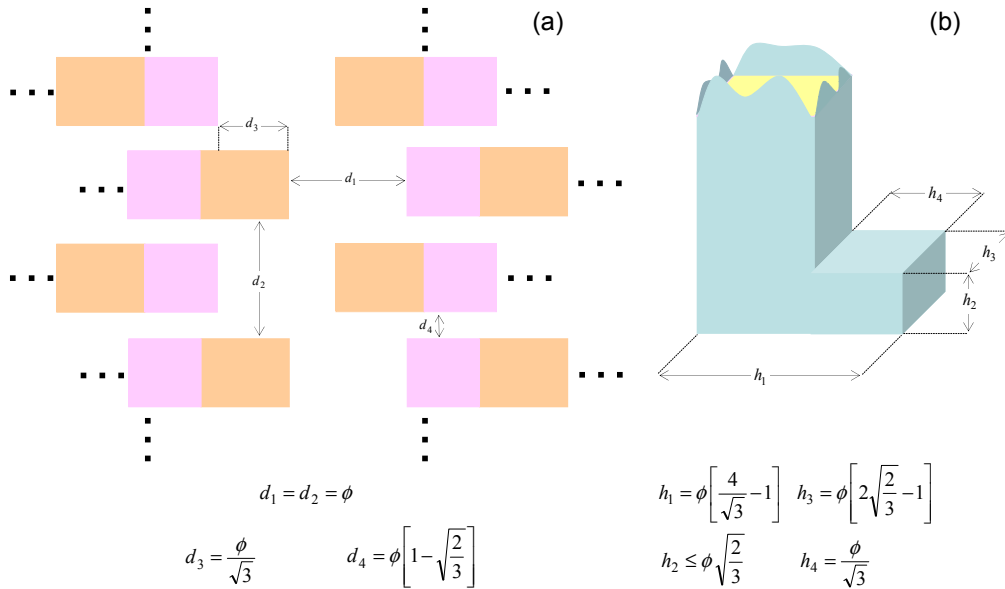
$$y_1 = \frac{\cos \frac{\theta_v}{2} + \frac{1}{2} \cos \frac{\theta_h}{2}}{\left( \cos \frac{\theta_v}{2} + \cos \frac{\theta_h}{2} \right)}; \quad y_4 = \frac{\cos \frac{\theta_v}{2}}{\left( \cos \frac{\theta_v}{2} + \cos \frac{\theta_h}{2} \right)} \quad (6.9)$$

Dentro de esta descripción, la fracción de volumen de la estructura ocupada por las esferas pasaría a depender exclusivamente de los ángulos  $\theta_h$  y  $\theta_v$  en la forma:

$$f(\theta_h, \theta_v) = \frac{\pi}{12 \sin \frac{\theta_h}{2} \sin \frac{\theta_v}{2} \left( \cos \frac{\theta_h}{2} + \cos \frac{\theta_v}{2} \right)} \quad (6.10)$$

(Naturalmente, en el caso en el que  $\theta_h = \theta_v \approx 109.47^\circ$ , la expresión (6.10) recupera el valor de la estructura diamante  $f = \frac{\pi\sqrt{3}}{16}$ )

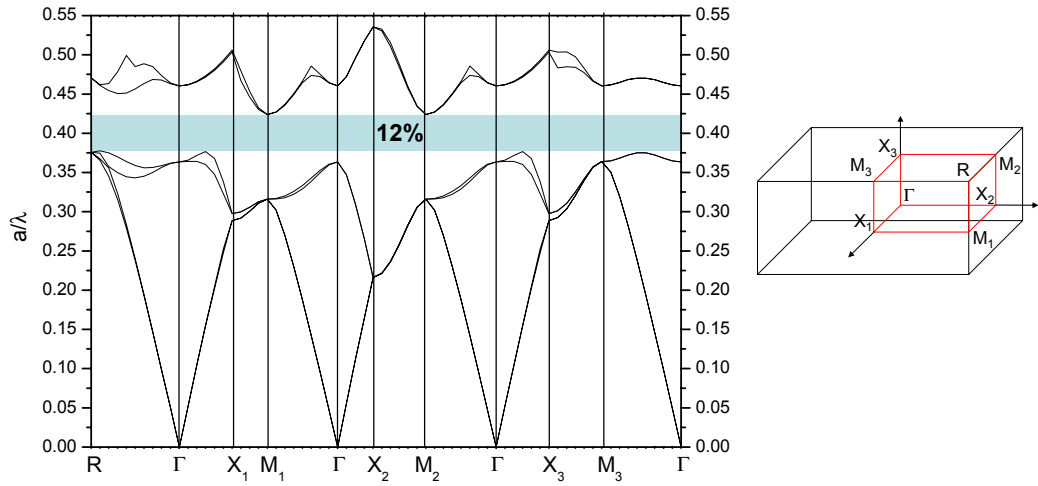
Y una vez completada la reformulación de la estructura, no se requiere más que un poco de paciencia para obtener los parámetros característicos del molde que se recogen en la Fig. 6.14. Como es lógico, cuanto mayor sea la dimensión vertical de los pilares mayor será el número de capas de la estructura.



**Figura 6.14 :** (a) Vista superior de la estructura de pilares, con las distancias de separación expresadas en términos del diámetro de las esferas. (b) Dimensiones características de cada pilar individual, expresadas en términos del diámetro de las esferas.

Aunque es evidente que la construcción de un molde semejante supondría un cierto esfuerzo tecnológico, tampoco resultaría inabordable con las modernas técnicas litográficas. En cualquier caso, una vez completada su fabricación, el proceso de sedimentación de las esferas en los huecos ya no requeriría del concurso de ningún operador, lo cual constituye sin duda una notable ventaja respecto al procedimiento de manipulación directa. Además, la estructura así construida se encontraría libre de buena parte de los inconvenientes asociados al tamaño finito de la muestra,<sup>23</sup> por no hablar de que la presencia de los pilares de los soporte podría llegar a suponer incluso una ventaja de cara a eventuales procesos de infiltración, ya que haría innecesario rellenar esa parte del espacio entre las esferas. Sin embargo, no podemos olvidar que, al igual que en el caso de la red mbcc, este diseño proporcionaría una estructura de esferas con  $f \approx 0.34$  y un gap claramente insuficiente incluso después de invertirse. Así pues, el incremento de la fracción de volumen ocupada por las esferas resultaría necesario una vez más, al menos hasta alcanzar el límite del 50 % con el que hemos aceptado conformarnos.

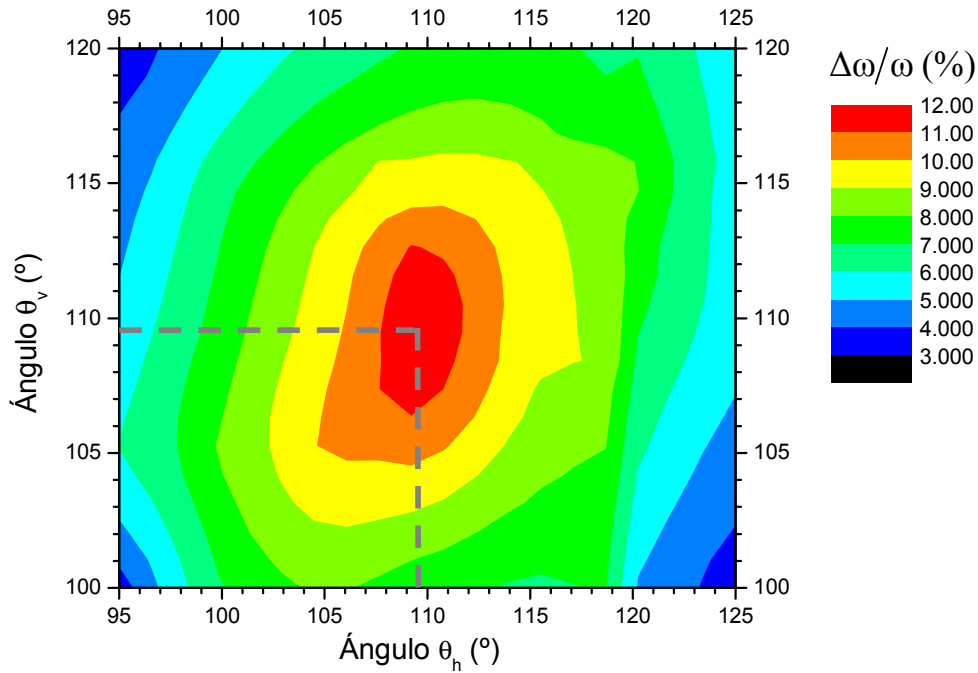
Es a ese particular sistema al que pertenece la estructura de bandas de la Fig. 6.15. Como cabía esperar, recuperamos el valor del 12 % para la anchura del gap, por más que la nueva base le proporcione un aspecto muy distinto al de la que se mostraba en la Fig. 2.5. Pero, ¿qué ocurriría si los ángulos de contacto entre las esferas no se correspondieran exactamente con los de una estructura diamante “perfecta”?



**Figura 6.15 :** Estructura de bandas fotónicas a lo largo de las direcciones de alta simetría de la 1ª ZB que se muestra en la parte derecha, calculada para una red diamante de esferas de aire rodeadas por silicio ( $\varepsilon = 12$ ) con un factor de llenado del 50 %. Adviértase que la coincidencia en los valores de  $\theta_h$  y  $\theta_v$  convierte en equivalentes los segmentos  $\overline{\Gamma X_1}$  y  $\overline{\Gamma X_3}$ , al igual que ocurre con  $\overline{\Gamma M_1}$  y  $\overline{\Gamma M_2}$ .

<sup>23</sup>Como la necesidad de medidas ópticas de alta resolución o el problema del “cleavage”.

En la Fig. 6.16 se representa la anchura relativa del gap completo para distintos  $\theta_h$  y  $\theta_v$  en el entorno de los valores “ideales” suponiendo un recrecimiento de las esferas tal que para una estructura puramente diamante la fracción de llenado alcanzase el 50 %. Según puede apreciarse, cualquier desviación se traduciría en una merma del gap, aunque su anchura aún se mantendría por encima del 5 % en el rango de distorsión definido por  $\Delta\theta_h = \pm 10^\circ$ ;  $\Delta\theta_v = \pm 10^\circ$ . Y es dicha persistencia del gap la que nos hace concebir esperanzas sobre la viabilidad del procedimiento, por más que tal límite de tolerancia deba acogerse con cautela al implicar una distribución uniforme de las desviaciones.



**Figura 6.16 :** Anchura relativa del gap completo para distintos  $\theta_h$  y  $\theta_v$  en el entorno de los valores característicos de la red diamante, determinados por el punto de corte de las líneas discontinuas. En todos los casos se ha supuesto un recrecimiento de las esferas tal que  $f$  sea igual a 0.5 para una estructura puramente diamante. Según puede apreciarse, el valor del gap se mantiene por encima del 5 % en el rango de distorsión definido por  $\Delta\theta_h = \pm 10^\circ$ ;  $\Delta\theta_v = \pm 10^\circ$ .

Ponemos dar, pues, por terminado este estudio preliminar con la firme convicción de que la presente estrategia de auto-ensamblaje, fruto de nuestra colaboración con el el Centro Tecnológico de Ondas de la UPV, se convertirá pronto en una realidad aún más prometedora que la descrita en el apartado anterior.

### 6.3. Conclusiones

En este capítulo se recogen tres trabajos diferentes, unidos por un propósito común: el estudio de las propiedades fotónicas presentes en los muy diversos sistemas estrechamente relacionados con los ópalos artificiales. Resumimos a continuación las principales conclusiones de cada uno de esos trabajos:

- La combinación de las técnicas numéricas para el cálculo de estructuras de bandas con el análisis de las propiedades de simetría de los autoestados nos ha permitido estudiar con detalle el proceso de infiltración de CdS en los ópalos a partir de una propiedad tan genérica como el espectro de reflectancia de la muestra. Además de corregir percepciones erróneas sobre la ausencia de homogeneidad óptica en el modelo de capas concéntricas, dicho estudio también ha proporcionado predicciones cuantitativas que se encuentran en buen acuerdo con los resultados experimentales, aunque todavía no ha sido posible determinar de manera inequívoca el mecanismo dominante en todas las etapas del proceso.
- Se ha presentado ante la comunidad científica la primera propuesta para la fabricación directa de una estructura diamante de esferas, basada en un aprovechamiento óptimo de diversas técnicas de la ciencia de materiales. El trabajo experimental originado por esa propuesta ha conducido a la obtención de las únicas redes diamante de esferas en la escala nanométrica de las que hay constancia hasta la fecha.
- La completa reinterpretación de la red diamante en términos de los ángulos de contacto entre las esferas que la componen ha hecho posible el diseño de una estrategia de auto-ensamblaje orientado a lo largo de la dirección (110) que permitiría soslayar algunos de los mayores inconvenientes de la manipulación microrrobótica. Como avance parcial de tal diseño, se han determinado los parámetros geométricos del sustrato guía y se ha llevado a cabo un análisis preliminar de la tolerancia del gap fotónico frente a errores sistemáticos en el proceso de construcción.

NOTA: Este capítulo está basado en las referencias [Blanco01] y [García-Santamaría01].

## Referencias

- [Blanco98] A. Blanco, C. López, R. Mayoral, H. Míguez, F. Meseguer, A. Mifsud y J. Herrero. *CdS photoluminescence inhibition by a photonic structure*. Applied Physics Letters **73** (13), 1781–1783, septiembre 1998.
- [Blanco01] A. Blanco, H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Photonic band gap properties of CdS-in-opal systems*. Applied Physics Letters **78** (21), 3181–3183, mayo 2001.
- [Chan95] C. T. Chan, Q. L. Yu y K. M. Ho. *Order- $N$  spectral method for electromagnetic waves*. Physical Review B **51** (23), 16635–16642, junio 1995.
- [Eradat01] N. Eradat, M. Wohlgenannt, Z. V. Vardeny, A. A. Zakhidov y R. H. Baughman. *Studies of optical transitions related to  $\pi$ -conjugated polymers and laser dyes infiltrated in opal photonic crystals*. Synthetic Metals **116** (1-3), 509–513, enero 2001.
- [Eradat02] N. Eradat, A. Y. Sivachenko, M. E. Raikh, Z. V. Vardeny, A. A. Zakhidov y R. H. Baughman. *Evidence for braggoriton excitations in opal photonic crystals infiltrated with highly polarizable dyes*. Applied Physics Letters **80** (19), 3491–3493, mayo 2002.
- [García-Santamaría01] F. García-Santamaría, C. López, F. Meseguer, F. López-Tejiera, J. Sánchez-Dehesa y H. Miyazaki. *Opal-like photonic crystal with diamond lattice*. Applied Physics Letters **79** (15), 2309–2311, octubre 2001.
- [García-Santamaría02a] F. García-Santamaría, F. Meseguer, C. López, H. Miyazaki, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Opal-like photonic crystal with diamond lattice*. En A. Adibi, A. Scherer y S.-Y. Lin (Eds.), *Photonic Bandgap Materials and Devices. Proceedings of SPIE vol 4655*, 42–47. SPIE, 2002.

- [García-Santamaría02b] F. García-Santamaría, H. Miyazaki, A. Urquía, M. Ibisate, M. Belmonte, N. Shinya, F. Meseguer y C. López. *Nanorobotic manipulation of microspheres for on-chip diamond architectures*. *Advanced Materials* **14** (16), 1144–1147, agosto 2002.
- [García-Santamaría03] F. García-Santamaría. *Photonic Crystals based on Silica Microspheres*. Tesis Doctoral, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, noviembre 2003.
- [Ho90] K. M. Ho, C. T. Chan y C. M. Soukoulis. *Existence of a photonic band gap in periodic dielectric structures*. *Physical Review Letters* **65** (25), 3152–3155, diciembre 1990.
- [Koenderink02] A. F. Koenderink, L. Bechger, H. P. Schriemer, A. Lagendijk y W. L. Vos. *Broadband fivefold reduction of vacuum fluctuations probed by dyes in photonic crystals*. *Physical Review Letters* **88** (14), 143903/1–4, abril 2002.
- [Lin02] Y. Lin, J. Zhang, E. H. Sargent y E. Kumacheva. *Photonic pseudo-gap-based modification of photoluminescence from CdS nanocrystal satellites around polymer microspheres in a photonic crystal*. *Applied Physics Letters* **81** (17), 3134–3136, octubre 2002.
- [London38] F. London. *The  $\lambda$ -phenomenon of liquid Helium and the Bose-Einstein degeneracy*. *Nature* **141** (3571), 643–644, abril 1938.
- [Míguez99] H. Míguez, A. Blanco, C. López, F. Meseguer, H. Yates, M. Pemble, F. López-Tejiera, F. García-Vidal y J. Sánchez-Dehesa. *Face centered cubic photonic bandgap materials based on opal-semiconductor composites*. *Journal of Lightwave Technology* **17** (11), 1975–1981, noviembre 1999.
- [Míguez02] H. Míguez, S. M. Yang, N. Tétreault y G. A. Ozin. *Oriented free-standing three-dimensional silicon inverted colloidal photonic crystal microfibers*. *Advanced Materials* **14** (24), 1805–1808, diciembre 2002.



- [Miyazaki00] H. T. Miyazaki, Y. Tomizawa, S. Saito, T. Sato y N. Shinya. *Adhesion of micrometer-sized polymer particles under a scanning electron microscope*. Journal of Applied Physics **88** (6), 3330–3340, septiembre 2000.
- [Saito02] S. Saito, H. T. Miyazaki, T. Sato y K. Takahasi. *Kinematics of mechanical and adhesional micromanipulation under a scanning electron microscope*. Journal of Applied Physics **92** (9), 5140–5149, noviembre 2002.
- [Torrecillas00] R. Torrecillas, A. Blanco, M. E. Brito, C. López, H. Míguez, F. Meseguer y J. S. Moya. *Microstructural study of CdS-opal composites*. Acta Materialia **48** (18-19), 4653–4657, diciembre 2000.
- [Vlasov97a] Y. A. Vlasov, K. Luterova, I. Pelant, B. Hönerlage y V. N. Astratov. *Enhancement of optical gain of semiconductors embedded in three-dimensional photonic crystals*. Applied Physics Letters **71** (12), 1616–1618, septiembre 1997.
- [Vlasov97b] Y. V. Vlasov, V. N. Astratov, O. Z. Karimov, A. A. Kaplyanskii, V. N. Bogomolov y A. V. . Prokofiev. *Existence of a photonic pseudogap for visible light in synthetic opals*. Physical Review B **55** (20), R13357–R13360, mayo 1997.
- [Yablonovitch91] E. Yablonovitch, T. J. Gmitter y K. M. Leung. *Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms*. Physical Review Letters **67** (17), 2295–2298, octubre 1991.



# CAPÍTULO 7

---

## Conclusiones generales

---

- El estudio sistemático de la dependencia angular en la respuesta espectral de los ópalos desnudos ha demostrado que un modelo analítico tan sencillo como la Ley de Bragg puede aplicarse con garantías a la caracterización estructural de estos sistemas, circunstancia que respalda su uso como vínculo de conexión entre las propiedades ópticas de los ópalos reales y las de las estructuras periódicas perfectas que los modelizan. En el transcurso de dicho estudio también ha podido comprobarse que la expansión layer-KKR constituye el método más eficiente para el cálculo de los espectros asociados a la cara  $\{111\}$  de los ópalos, en contra de las previsiones más conservadoras respecto a su rango de aplicabilidad.
- El análisis de las propiedades de simetría del campo electromagnético por medio de la Teoría de Representaciones se ha revelado como una herramienta muy útil para el estudio de los cristales fotónicos, al proporcionarnos la explicación de algunos fenómenos harto difíciles de interpretar a partir del mero cálculo de la estructura de bandas. En esa línea, se han obtenido expresiones explícitas para los caracteres de las diversas representaciones irreducibles del campo eléctrico y se ha demostrado de forma rigurosa la conexión entre las propiedades de simetría de bandas y autoestados individuales en el caso de un problema vectorial de autovalores genérico. Estos desarrollos formales han hecho posible adaptar el cálculo de caracteres a los esquemas numéricos empleados a lo largo de la memoria.

- La caracterización de las representaciones irreducibles asociadas a cada uno de los autoestados del campo electromagnético en un ópalo desnudo ha permitido la determinación de las bandas que resultan inaccesibles para la luz incidente a causa de la incompatibilidad entre sus respectivas propiedades de simetría. Esta circunstancia, verificada de forma cuantitativa por medio de un cálculo numérico independiente, también ha hecho posible la predicción de efectos observables en la respuesta óptica de los ópalos. Algunos de estos efectos ya han sido confirmados experimentalmente, poniendo así de manifiesto la importancia de tener en cuenta toda la información contenida en los cálculos de estructura de bandas a la hora de intentar entender la compleja interacción entre la luz y los cristales fotónicos.
- Gracias a la combinación de las técnicas numéricas para el cálculo de estructuras de bandas con el análisis de las propiedades de simetría de los autoestados, hemos podido estudiar con detalle el proceso de infiltración de CdS en los ópalos a partir de una propiedad tan genérica como el espectro de reflectancia de la muestra. Además de corregir percepciones erróneas sobre la ausencia de uniformidad óptica en el modelo de capas concéntricas, dicho estudio también ha proporcionado predicciones cuantitativas que se encuentran en buen acuerdo con los resultados experimentales, aunque todavía no ha sido posible determinar de forma inequívoca el mecanismo dominante en todas las etapas del proceso.
- Se ha presentado ante la comunidad científica la primera propuesta para la fabricación directa de una estructura diamante de esferas, basada en un aprovechamiento óptimo de diversas técnicas de la ciencia de materiales. El trabajo experimental originado por esa propuesta ha conducido a la obtención de las únicas redes diamante de esferas en la escala nanométrica de las que hay constancia hasta la fecha.
- La completa reinterpretación de la red diamante en términos de los ángulos de contacto entre las esferas que la componen ha hecho posible el diseño de una estrategia de auto-ensamblaje orientado a lo largo de la dirección (110) que permitiría soslayar algunos de los mayores inconvenientes de la manipulación microrrobótica. Como avance parcial de tal diseño, se han determinado los parámetros geométricos del sustrato guía y se ha llevado a cabo un análisis preliminar de la tolerancia del gap fotónico frente a errores sistemáticos en el proceso de construcción.

# APÉNDICE A

---

## Demostración del Teorema de Construcción de $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$

---

Se presenta aquí la demostración de Teorema de Construcción de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , junto con algunos comentarios sobre sus inmediatas consecuencias. La inclusión de este apéndice se justifica por el hecho de que su contenido no se recoge de forma explícita en ninguna de las referencias.

**Teorema A.1.** *Si  $K_1$  y  $K_2$  son dos puntos dentro de la parte irreducible de la 1ª ZB, cualquier otro punto  $\mathbf{k}$  situado sobre el segmento que los une tendrá el mismo “pequeño co-grupo”  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , concretamente el formado por todas las operaciones comunes a  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_1)$  y  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}_2)$  que además verifiquen*

$$\left. \begin{aligned} \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_1 &= \mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \\ \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}' \end{aligned} \right\} \text{ con } \mathbf{q} = \mathbf{q}'$$

*Demostración.* Comenzaremos por escribir  $\mathbf{k}$  en la forma

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \alpha(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \quad \alpha \in (0, 1) \quad (\text{A.1})$$

Así, al aplicar el operador de simetría sobre el vector,

$$\begin{aligned} \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k} &= \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_1 + \alpha(\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_2 - \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_1) \\ &= (1 - \alpha)\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_1 + \alpha\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}_2 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Para que la operación  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  forme parte  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  debe cumplirse que

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{q} \quad (\text{A.3})$$

Como no es difícil encontrar contraejemplos para esta definición si  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  no está contenida simultáneamente en ambos “pequeños co-grupos”, podemos limitarnos al estudio del caso en el que  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\} \in \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_1) \cap \mathcal{G}_0(\mathbf{k}_2)$ . Entonces,

$$\begin{aligned} \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k} &= (1 - \alpha)(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) + \alpha(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}') \\ &= \mathbf{k}_1 + \alpha(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + (1 - \alpha)\mathbf{q} + \alpha\mathbf{q}' \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Para cumplir la definición de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$  basta con demostrar que el vector  $(1 - \alpha)\mathbf{q} + \alpha\mathbf{q}'$  forma parte de la red recíproca. Y dado que el parámetro  $\alpha$  puede tomar cualquier valor en el intervalo  $(0, 1)$ , ello obliga necesariamente a que  $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$   $\square$

**Corolario A.1.** *Para cualesquiera  $\mathbf{k}', \mathbf{k}''$  situados sobre el segmento que une  $K_1$  con  $K_2$ , se cumple que*

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}' - \mathbf{k}' = \{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\mathbf{k}'' - \mathbf{k}'' = \mathbf{q} \quad (\text{A.5})$$

*si la operación  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}$  está contenida en  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .*

*Nota.* Este primer corolario se deduce inmediatamente de la ecuación A.4. Su consecuencia más importante es que  $\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') = \mathbf{k}'' - \mathbf{k}'$

**Corolario A.2.** *Para cualesquiera  $\mathbf{k}', \mathbf{k}''$  situados sobre el segmento que une  $K_1$  con  $K_2$  tales que*

$$\begin{cases} \mathbf{k}'' &= \mathbf{k}' + \delta\mathbf{k} \\ |\delta\mathbf{k}| &\ll \min\{|\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''|\} \\ c_{n''}(\mathbf{k}'') &\approx c_{n'}(\mathbf{k}') \end{cases}$$

*se cumple que si el conjunto de autofunciones  $\{\Psi_{\mathbf{k}',g}^{n'}(\mathbf{r})\}$  es una representación irreducible  $R$  de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ , el conjunto  $\{\Psi_{\mathbf{k}'',g}^{n''}(\mathbf{r})\}$  también lo es.*

*Nota.* Los dos resultados anteriores nos permiten concluir que, bajo las hipótesis del enunciado,

$$\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\Psi_{\mathbf{k}'',g}^{n''}(\mathbf{r}) = e^{i\delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\{\hat{A} \mid \mathbf{0}\}\Psi_{\mathbf{k}',g}^{n'}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.6})$$

Puesto que para cada punto del espacio ambos conjuntos de funciones transformadas sólo difieren en un factor constante, han de constituir la misma representación de  $\mathcal{G}_0(\mathbf{k})$ .

# APÉNDICE B

---

## Relaciones de compatibilidad entre representaciones

---

### B.1. Reducción de representaciones

Para obtener la expresión de cualquier representación  $\Gamma$  de un grupo  $\mathcal{G}$  en términos de sus representaciones irreducibles, basta con calcular la **multiplicidad** de cada una:

$$\Gamma = \oplus a_i R^i \quad (\text{B.1})$$

Y dado un grupo  $\mathcal{G}$  con  $h$  elementos, es posible demostrar que el valor asociado a la  $i$ -ésima representación irreducible en (B.1) se corresponde con el resultado de dividir entre la dimensión del grupo la suma sobre todos sus elementos del producto de los caracteres asociados a las representaciones  $\Gamma$  y  $R^i$ , es decir

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^h \chi^\Gamma(G_j) \chi^{R^i}(G_j)^* \quad (\text{B.2})$$

Análogamente, si se conoce la distribución de los diferentes caracteres en  $m$  clases de equivalencia,

$$a_i = \frac{1}{h} \sum_m N_m \chi_m^\Gamma \chi_m^{R^i*} \quad (\text{B.3})$$

donde  $N_m$  es el número de caracteres dentro de cada clase.

## B.2. Aplicación a los puntos especiales de una red fcc

**Tabla B.1 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $\Gamma$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$\Gamma[O_h]$	$\overline{\Gamma X}[C_{4v}]$	$\overline{\Gamma U}[C_{1h}]$	$\overline{\Gamma L}[C_{3v}]$	$\overline{\Gamma K}[C_{2v}]$	$\overline{\Gamma W}[C_{1h}]$
$A_{1g}$	$A_1$	$A'$	$A_1$	$A_1$	$A'$
$A_{2g}$	$B_1$	$A''$	$A_2$	$B_2$	$A'$
$E_g$	$A_1 \oplus B_1$	$A' \oplus A''$	$E$	$A_1 \oplus B_2$	$2A'$
$T_{1g}$	$E \oplus A_2$	$A' \oplus 2A''$	$E \oplus A_2$	$A_2 \oplus B_1 \oplus B_2$	$A' \oplus 2A''$
$T_{2g}$	$E \oplus B_2$	$2A' \oplus A''$	$E \oplus A_1$	$A_1 \oplus A_2 \oplus B_1$	$A' \oplus 2A''$
$A_{1u}$	$A_2$	$A''$	$A_2$	$A_2$	$A''$
$A_{2u}$	$B_2$	$A'$	$A_1$	$B_1$	$A''$
$E_u$	$A_2 \oplus B_2$	$A' \oplus A''$	$E$	$A_2 \oplus B_1$	$2A''$
$T_{1u}$	$E \oplus A_1$	$2A' \oplus A''$	$E \oplus A_1$	$A_1 \oplus B_1 \oplus B_2$	$2A' \oplus A''$
$T_{2u}$	$E \oplus B_1$	$A' \oplus 2A''$	$E \oplus A_2$	$A_1 \oplus A_2 \oplus B_2$	$2A' \oplus A''$

**Tabla B.2 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $X$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$X[D_{4h}]$	$\overline{\Gamma X}[C_{4v}]$	$\overline{XU}[C_{2v}]$	$\overline{XW}[C_{2v}]$
$A_{1g}$	$A_1$	$A_1$	$A_1$
$A_{2g}$	$A_2$	$B_2$	$B_2$
$B_{1g}$	$B_1$	$B_2$	$A_1$
$B_{2g}$	$B_2$	$A_1$	$B_2$
$E_g$	$E$	$A_2 \oplus B_1$	$A_2 \oplus B_1$
$A_{1u}$	$A_2$	$A_2$	$A_2$
$A_{2u}$	$A_1$	$B_1$	$B_1$
$B_{1u}$	$B_2$	$B_1$	$A_2$
$B_{2u}$	$B_1$	$A_2$	$B_1$
$E_u$	$E$	$A_1 \oplus B_2$	$A_1 \oplus B_2$

**Tabla B.3 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $L$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$L[D_{3d}]$	$\overline{\Gamma L}[C_{3v}]$	$\overline{LW}[C_2]$	$\overline{LU}[C_{1h}]$	$\overline{LK}[C_{1h}]$
$A_{1g}$	$A_1$	$A$	$A'$	$A'$
$A_{2g}$	$A_2$	$B$	$A''$	$A''$
$E_g$	$E$	$A \oplus B$	$A' \oplus A''$	$A' \oplus A''$
$A_{1u}$	$A_2$	$A$	$A''$	$A''$
$A_{2u}$	$A_1$	$B$	$A'$	$A'$
$E_u$	$E$	$A \oplus B$	$A' \oplus A''$	$A' \oplus A''$



**Tabla B.4 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $U$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$U[C_{2v}]$	$\overline{\Gamma}U[C_{1h}]$	$\overline{X}U[C_{2v}]$	$\overline{L}U[C_{1h}]$	$\overline{U}W[C_{1h}]$
$A_1$	$A'$	$A_1$	$A'$	$A'$
$A_2$	$A''$	$A_2$	$A''$	$A''$
$B_1$	$A'$	$B_1$	$A'$	$A''$
$B_2$	$A''$	$B_2$	$A''$	$A'$

**Tabla B.5 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $W$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$W[D_{2d}]$	$\overline{\Gamma}W[C_{1h}]$	$\overline{X}W[C_{2v}]$	$\overline{L}W[C_2]$	$\overline{U}W[C_{1h}]$	$\overline{W}K[C_{1h}]$
$A_1$	$A'$	$A_1$	$A$	$A'$	$A'$
$A_2$	$A''$	$A_2$	$B$	$A''$	$A''$
$B_1$	$A''$	$A_2$	$A$	$A''$	$A''$
$B_2$	$A'$	$A_1$	$B$	$A'$	$A'$
$E$	$A' \oplus A''$	$B_1 \oplus B_2$	$A \oplus B$	$A' \oplus A''$	$A' \oplus A''$

**Tabla B.6 :** Relaciones de compatibilidad entre representaciones irreducibles en torno al punto  $K$  de una red fcc. Los “pequeños co-grupos” involucrados se indican entre corchetes.

$K[C_{2v}]$	$\overline{\Gamma}K[C_{2v}]$	$\overline{L}K[C_{1h}]$	$\overline{W}K[C_{1h}]$
$A_1$	$A_1$	$A'$	$A'$
$A_2$	$A_2$	$A''$	$A''$
$B_1$	$B_1$	$A'$	$A''$
$B_2$	$B_2$	$A''$	$A'$



# APÉNDICE C

---

## Publicaciones

---

1. J. F. Galisteo-López, F. López-Tejiera, S. Rubio, C. López y J. Sánchez-Dehesa. *Experimental evidence of polarization dependence in the optical response of opal-based photonic crystals*. Applied Physics Letters **82** (23), 4068-4070, junio 2003.
2. F. García-Santamaría, F. Meseguer, C. López, H. Miyazaki, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Opal-like photonic crystal with diamond lattice*. En A. Adibi, A. Scherer y S.-Y. Lin (Eds.), *Photonic Bandgap Materials and Devices. Proceedings of SPIE vol 4655*, 42-47. SPIE, 2002.
3. F. López-Tejiera, T. Ochiai, K. Sakoda y J. Sánchez-Dehesa. *Symmetry characterization of eigenstates in opal-based photonic crystals*. Physical Review B **65**, 195110/1-8, abril 2002.
4. F. García-Santamaría, C. López, F. Meseguer, F. López-Tejiera, J. Sánchez-Dehesa y H. Miyazaki. *Opal-like photonic crystal with diamond lattice*. Applied Physics Letters **79** (15), 2309-2311, octubre 2001.
5. H. Míguez, A. Blanco, F. García-Santamaría, M. Ibisate, C. López, F. Meseguer, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Inverse opals fabrication*. En C. Soukoulis (Ed.), *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century, Nato ASI Series C vol 563*, 219 (2001).
6. A. Blanco, H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Photonic band gap properties of CdS-in-opal systems*. Applied Physics Letters **78** (21), 3181-3183, mayo 2001.

7. H. Míguez, F. Meseguer, C. López, F. López-Tejiera y J. Sánchez-Dehesa. *Synthesis and photonic bandgap characterization of polymer inverse opals*. Advanced Materials **13** (6), 393-396, marzo 2001.
8. H. Míguez, A. Blanco, C. López, F. Meseguer, H. Yates, M. Pemble, F. López-Tejiera, F. García-Vidal y J. Sánchez-Dehesa. *Face centered cubic photonic bandgap materials based on opal-semiconductor composites*. Journal of Lightwave Technology **17** (11), 1975-1981, noviembre 1999.
9. A. Reynolds, F. López-Tejiera, D. Cassagne, F. García-Vidal, C. Jouanin y J. Sánchez-Dehesa. *Spectral properties of opal-based photonic crystals having a  $\text{SiO}_2$  matrix*. Physical Review B **60** (16), 11422-11426, octubre 1999.



